# ELEKTRONISCHER ENERGIEVERLUST VON $H^+$, $D^+$ UND $HE^+$ IN EIN- UND POLYKRISTALLINEN GOLDFILMEN IM ENERGIEBEREICH VON 0,7 BIS 16 KEV

ROBERT BLUME

1981

# ELEKTRONISCHER ENERGIEVERLUST
# von $H^+$, $D^+$ und $HE^+$
# in EIN- und POLYKRISTALLINEN GOLDFILMEN
# im ENERGIEBEREICH von 0,7 bis 16 KEV

DISSERTATION
der Fakultät für Physik
der Ludwigs-Maximilians-Universität München

vorgelegt von
Diplom-Physiker
Robert Blume
aus München

München, den 31. Juli 1980

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41545801_0063

1. Gutachter: Prof. Dr. R. Sizmann

2. Gutachter: Univ.-Doz. Dr. H.-D. Betz

Tag der mündlichen Prüfung: 9. 2. 1981

# I N H A L T S A N G A B E


Seite

1. Einleitung . . . . . 1

2. Theoretische Grundlagen . . . . . 4

2.1 Nuklearer Energieverlust . . . . . 6

2.2 Elektronischer Energieverlust . . . . . 10

2.2.1 Energieverbreiterung . . . . . 22

2.3 Einfluß der Gitterführung auf den Energieverlust . . . . . 23

3. Experimenteller Teil . . . . . 27

3.1 Apparatur . . . . . 27

3.1 Gewinnung der Meßdaten . . . . . 31

3.2 Targets . . . . . 34

3.2.1 Herstellung des Targets. . . . . 34

3.2.2 Targetcharakterisierung. . . . . 36

3.2.3 Dickenbestimmung der Targets . . . . . 38

3.3 Meßergebnisse und Vergleich mit Ergebnissen anderer Autoren . . . . . 39

3.3.1 Form der Energieverteilungen . . . . . 39

3.3.2 Bestimmung des Energieverlustes . . . 47

3.3.3 Halbwertsbreiten der Energieverteilungen 62

3.3.4 Winkelverteilungen . . . . . 64

4. Diskussion der Meßergebnisse . . . . . 70

4.1 Einfluß der nuklearen Wechselwirkung auf die Bestimmung des elektronischen Energieverlustes . . . . . 70

4.2 Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit der Theorie . . . . . 82

4.2.1 Vergleich der Proportionalitätskonstanten im Bereich der Geschwindigkeitsproportionalität . . . . . 83

4.2.2 Interpretation der Abweichung des experimentellen Energieverlustes von der Geschwindigkeitsproportionalität . . . . . 87

4.2.2.1 Effektive Ladung des Projektilions . 88

4.2.2.2 Inhomogenität des Valenzelektronengases . . . . . 89

4.2.3 Energie-Straggling . . . . . 92

5. Zusammenfassung . . . . . 94

6. Literaturübersicht . . . . . 97

## 1. Einleitung

Das Problem der Abbremsung von schnellen geladenen Teilchen im Festkörper spielte eine bedeutende Rolle bei der Untersuchung der atomaren Eigenschaften der Kathoden- und Kanalstrahlen, der natürlichen Radioaktivität und der Streuung von α-Teilchen an dünnen Metallfilmen.
Niels Bohr (1913) schuf die klassische Theorie für das Verständnis des Energieverlustprozesses für Teilchen mit Geschwindigkeiten v größer als der Bohrschen Geschwindigkeit $v_o = e^2/\hbar$. Er zeigte, daß für solche Teilchen die Abbremsung eine Folge der Stöße mit den Elektronen ist. Von ihm stammt auch die Auftrennung des Energieverlustes in einen nuklearen Teil, entsprechend der Streuung an den Kernen und in einen elektronischen Teil, entsprechend der Streuung an den Elektronen. Die aus letzterer resultierende Ablenkung ist dabei infolge der sehr kleinen Elektronenmasse gegenüber der Ablenkung an den Kernen vernachlässigbar. Bethe (1930) und Bloch (1933) verbesserten die Bohrsche Theorie durch quantenmechanische Korrekturen. Die erste zusammenfassende Publikation über die Abbremsung energiereicher Ionen in Materie veröffentlichte Bohr (1948).

Gewissermaßen als Nebenprodukt entstand die erste theoretische Untersuchung des elektronischen Energieverlustes von Myonen mit Geschwindigkeiten wesentlich kleiner als $v_o$ im Festkörper durch Fermi und Teller (1947). Sie kamen über die Näherung eines freien entarteten Elektronengases für die Festkörperelektronen und der Berücksichtigung des Pauli-Prinzipes zu dem Ergebnis, daß der elektronische Energieverlust zur Geschwindigkeit proportional ist.

Das praktische Interesse für den Energieverlust in diesem Geschwindigkeitsbereich entstand durch die zunehmende technische Bedeutung der Ionenimplantation (Überblick Dearnaley et al., 1973). Hier kam es darauf an, die Reich-

weiten von Ionen in Festkörpern über den Energieverlust zu bestimmen. Der Schwerpunkt der experimentellen und theoretischen Untersuchungen lag dabei auf dem Gebiet der schweren Ionen, wie z.B. bei der Dotierung von Halbleitern.
Dies führte zur Weiterentwicklung der Bohrschen Konzepte unter Einbeziehung des statistischen Atommodells von Thomas und Fermi (Thomas, 1927, Fermi, 1928) und der theoretischen Ansätze von Fermi und Teller durch Lindhard und Mitarbeiter (1954, 1961, 1963, 1965, 1965 und 1968). Sie entwickelten eine dielektrische Theorie des elektronischen Energieverlustes für die Abbremsung schneller Ionen in einem freien entarteten Elektronengas. Vermutlich unabhängig von Lindhard wurde der gleiche Weg von Trubnikov und Yavlinskii (1965) beschritten. Sie führten außerdem einen Vergleich der verschiedenen theoretisch möglichen Ansätze durch, die letztlich alle für Ionengeschwindigkeiten $v << v_o$ zur v-Proportionalität führten.

Das Interesse für die Abbremsung von Protonen und Heliumionen dieses Geschwindigkeitsbereiches wurde durch das Wandproblem in einem thermonuklearen Reaktor (Behrisch, 1974) geweckt. Dies führte zu einer Überarbeitung und Erweiterung der bisherigen Energieverlusttheorien durch Ferrell und Ritchie (1977).
Neben der Berücksichtigung der Inhomogenitäten des Elektronengases eines realen Metalls berücksichtigen sie auch die zusätzliche Abschirmung durch gebundene Elektronen bei teilweise ionisierten Projektilen.
Die Tatsache, daß für den Energieverlust leichter Ionen nur die Valenzelektronenanregung eine Rolle spielt, gibt Messungen in diesem Geschwindigkeitsbereich eine prinzipielle Bedeutung. So lassen sich aus solchen Energieverlustmessungen Erkenntnisse über die Lokalisierung der Valenzelektronen gewinnen.

Zweckmäßigerweise bestimmt man den Energieverlust in einem Transmissionsexperiment, bei dem ein Teilchenstrahl fester Primärenergie $E_o$ nach dem Durchgang durch eine möglichst dünne Folie bekannter Dicke in Einschußrichtung energieanalysiert wird. Macht man dies bei einem sehr kleinen Öffnungswinkel des Detektors, besonders für leichte Ionen, so erreicht man, daß nur Teilchen analysiert werden, die schwach abgelenkt wurden und damit wenig Energie in elastischen Stößen mit Targetatomen verloren haben. Bei Ausnutzung des Gitterführungseffektes an einkristallinen Filmen erreicht man eine weitere Reduzierung des nuklearen Energieverlustes. Ferner gibt die Messung des elektronischen Energieverlustes von gittergeführten Ionen im Vergleich der verschiedenen Richtungen Information über die Inhomogenität des Valenzelektronengases im Kristall. Daß bisher nur eine geringe Zahl von Messungen im Geschwindigkeitsbereich $v < v_o$ existiert und daß die Ergebnisse verschiedener Autoren sehr unterschiedlich sind, liegt im Wesentlichen an der Schwierigkeit, sehr dünne Filme in guter Homogenität herzustellen. Dies gilt insbesondere für die einkristallinen Filme, die zudem noch sehr gute Kristalleigenschaften aufweisen müssen.
Högberg et al. (1970) erhielten für $H^+$ und $He^+$ in Gold <110> und <112> eine Proportionalität des Energieverlustes zu $E^{0,9}$ für $v < 0,4\ v_o$. Hierfür fanden sie keine Erklärung. Hingegen zeigten die Messungen von Nomura et al. (1975) von H und He in polykristallinen Filmen für $0,3\ v_o < v < 0,8\ v_o$ keine Abweichung von der erwarteten v-Proportionalität.
Für Energien über 10 keV bis etwa 25 keV, d.h. $0,6\ v_o < v \lesssim v_o$), gibt es für Protonen die Arbeiten von Bätzner (1936), Gott et al. (1962), Morita et al. (1967), Morton et al. (1967) und Cano (1972) über die Abbremsung von Protonen in polykristallinem Gold. Alle diese Messungen bestätigen die erwartete v-Proportionalität des Energieverlustes, soweit genügend Meßpunkte für eine solche Aussage vorlagen. Es wurde bisher überwiegend an Gold gemessen, weil Gold wegen seines Edelmetallcharacters wenig Verunreinigungen adsorbiert.

Für diese Arbeit ergab sich die Aufgabe, einen Beitrag zum Verständnis der Ion-Metallelektronen-Wechselwirkung und zur Aufklärung der Diskrepanzen zwischen den Messungen der verschiedenen Autoren durch die Untersuchung des Energieverlustes von $H^+$, $D^+$ und $He^+$ in Gold zu leisten. Hierbei spielte die Überprüfung der v-Proportionalität des elektronischen Energieverlustes für Geschwindigkeiten $v < v_o$ für Wasserstoff und Helium eine besondere Rolle. Die Messung des Energieverlustes in Gold für einen Polykristall und für die offensten Kristallrichtungen <110> und <100>, auch erstmalig für Austrittsrichtungen der Ionen ungleich der Einschußrichtung, erschien hinsichtlich zu erwartender Unterschiede infolge der Inhomogenität des realen Valenzelektronengases interessant. In dem Vergleich der Energieverluste von $H^+$ und $D^+$ zeigte sich eine Möglichkeit, die Vernachlässigbarkeit des nuklearen Energieverlustes zu überprüfen. Aus dem Vergleich der Energieverlustwerte von $H^+$ und $He^+$ konnte man Auskunft über die effektive Ladung von $He^+$ erwarten. Information über die Ionenbahnen konnte man aus der Messung von Winkelverteilungen und der Durchführung von Computersimulationen erwarten.
Die Tatsache, daß die meisten transmittierten Teilchen das Target neutral verlassen, erforderte auch eine Messung der Energieverteilungen der neutralen Teilchen. Bei den früheren Messungen blieb ungeprüft, ob das Energiespektrum der Neutralen die gleiche Verteilung zeigt wie das Spektrum der Positiven.

## 2. Theoretische Grundlagen

Bewegt sich ein Ion durch einen Kristall, so tritt es in Wechselwirkung mit den Gitterbausteinen und den Gitterelektronen. Hierbei verliert das Ion Energie und wird abgelenkt. In dem in dieser Arbeit untersuchten Primärenergiebereich von 2 bis 20 keV gibt es zwei Arten von Energieverlustprozessen:

1) Die elastische Coulombwechselwirkung der durch die Elektronen abgeschirmten Kernladung der Kristallbausteine mit der abgeschirmten Ladung des Ions. Der sich daraus ergebende Energieverlust heißt elastischer oder nuklearer Energieverlust.

2) Die inelastische Wechselwirkung des Ions mit den Elektronen des Kristalls. Inelastisch deswegen, weil kinetische Energie des Ions in Anregungsenergie der Elektronen umgesetzt wird. Dieser Energieverlust wird als inelastischer oder elektronischer Energieverlust bezeichnet.

Diese Auftrennung in nuklearen und elektronischen Energieverlust ist für die Ion-Festkörperwechselwirkung zuerst von Bohr (1948) systematisch durchgeführt worden.
Bevor nun die Theorien beider Prozesse besprochen werden, wird der Begriff des differentiellen Energieverlustes dE pro Einheitsweglänge dx (stopping power) durch

$$(1) \qquad \frac{dE}{dx} = N \int T \, d\sigma(E,T) := N S$$

definiert (Bohr, 1948, Lindhart, Scharff und Schiøtt,1963, Sigmund, 1973). N ist die Zahl der Streuzentren pro Einheitsvolumen, $d\sigma(E,T)$ der differentielle Streuquerschnitt für einen Energieübertrag zwischen T und T+dT an ein Targetteilchen, und E ist die Energie des Ions. Die Größe S heißt Bremsquerschnitt (stopping cross section). Diese Definition beinhaltet eine kontinuierliche Abbremsung des Ions. Dies ist gerechtfertigt, wenn der Energieverlust pro Stoß klein gegen die momentane Ionenenergie ist.
Die mittlere quadratische Fluktuation im Energieverlust dE ist durch (Bohr, 1948, Sigmund, 1973)

$$(2) \qquad (dE)^2 = N \, dx \int d\sigma \, T^2 = N \Omega^2 \, dx$$

definiert. $\Omega$ ist die Standardabweichung (energy straggling) der Poissonverteilung um dE.

## 2.1 Nuklearer Energieverlust

Die Berechnung des differentiellen nuklearen Energieverlustes nach der Beziehung (1) setzt die Kenntnis des Wechselwirkungspotentials im Stoß zwischen Ion und Festkörperatom voraus, da sowohl der Energieübertrag T als auch der Wirkungsquerschnitt $d\sigma$ potentialabhängig sind.

Unter der Voraussetzung, daß die Relativgeschwindigkeit $v_r$ der stoßenden Teilchen klein ist gegen die Bahngeschwindigkeiten der Atomelektronen, d.h.: $v_r < Z_1^{2/3} v_o$, schlugen Firsov (1957) und Lindhard und Scharff (1961) folgendes interatomares Potential vor:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad , \tag{3}$$

wobei r der Abstand der stoßenden Teilchen, $Z_1$ und $Z_2$ die Kernladungszahlen von Projektil und Targetatomen, e die Elementarladung und a die Abschirmlänge sind. Die Abschirmung der Kernladung von Projektil und Targetatom durch deren Elektronenhüllen wird durch die Funktion $\Phi$ beschrieben. Sowohl Lindhard als auch Firsov führten für $\Phi$ die universelle Thomas-Fermi-Abschirmfunktion $\Phi_o$ (Thomas, 1927, Fermi, 1928, Gombas, 1956) eines Einzelatoms ein. Durch Modifikation der Thomas-Fermi-Konstante

$$a_{TF} = \left[\frac{9\pi^2}{128}\right]^{1/3} \frac{a_o}{Z^{1/3}} = 0{,}8853 \frac{a_o}{Z^{1/3}} \quad , \tag{4}$$

mit dem Bohrschen Radius $a_o = \frac{\hbar}{m_e e^2} = 0{,}529\ \text{Å}$, $m_e$ ist die Elektronenmasse, erhält Firsov für die Abschirmkonstante a

$$a_F = \frac{0.8853\ a_o}{\left[Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}\right]^{2/3}} \tag{5}$$

und Lindhard et al.

$$(6) \qquad a_L = \frac{0.8853\ a_o}{\left[Z_1^{2/3}+Z_2^{2/3}\right]^{1/2}} \ .$$

Man sieht, daß $a_F < a_L$ für alle $Z_1, Z_2$ ist. Wie man aus Tab. 1 entnehmen kann, spielt für die Projektil-Target-Kombinationen dieser Arbeit der Unterschied zwischen $a_F$ und $a_L$ keine Rolle.

| Projektil-Target | $Z_1$ | $Z_2$ | $a_F$ [Å] | $a_L$ [Å] |
|---|---|---|---|---|
| $H^+ \rightarrow Au$ | 1 | 79 | 0,101 | 0,106 |
| $He^+ \rightarrow Au$ | 2 | 79 | 0,098 | 0,102 |

Tab. 1: Abschirmradien nach Lindhard und Firsov.

Das in dieser Arbeit benutzte Computersimulationsprogramm "MARLOWE" (Robinson et al., 1974) verwendet für die Thomas-Fermi-Abschirmfunktion $\Phi$ die Molièrsche Näherung (Molière, 1947, Torrens, 1972)

$$(7) \qquad \Phi' = 0.35\ e^{-0,3\ r/a} + 0,55\ e^{-1,2\ r/a} + 0,10\ e^{-6\ r/a}.$$

Diese beschreibt für große Abstände der Atome ($r \approx 1$ Å) das Wechselwirkungspotential realistischer als die für große r/a Werte mit $(r/a)^{-3}$ abfallende universelle Abschirmfunktion $\Phi_o$.
Lindhard, Scharff und Schiøtt (1963), kurz als LSS-Theorie bezeichnet, berechneten für das Potential (3) einen approximativen Ausdruck für den Streuwirkungsquerschnitt dc als Funktion von nur einer Variablen t, nämlich:

$$(8) \qquad d\sigma = \frac{\pi\, a_L^2\, dt\, f\,(t^{1/2})}{2\, t^{3/2}} \quad ,$$

mit

$$(9) \qquad (t)^{1/2} = \varepsilon \sin(\Theta/2)$$

und der reduzierten Energie

$$(10) \qquad \varepsilon = \frac{E\, a_L\, M_2}{Z_1 Z_2 e^2 (M_1+M_2)} \quad ,$$

$\Theta$ als dem Ablenkwinkel im Schwerpunktsystem und f als der universellen Streufunktion. Diese wurde von Lindhard, Nielsen und Scharff (1968) numerisch berechnet und tabelliert. Die numerische Integration von Beziehung (1) unter Berücksichtigung von (8) ergibt den nuklearen Energieverlust, der in Abb. 1 in Einheiten der reduzierten Energie und der reduzierten Länge

$$(11) \qquad \rho = \frac{x\, N\, M_2\, 4\pi\, a_L^2\, M_1}{(M_1 + M_2)^2}$$

als Funktion von $(\varepsilon)^{1/2}$ nach Lindhard, Scharff und Schiøtt aufgetragen ist.

Eine Näherung für das Potential (3) ist das Potenzpotential

$$(12) \qquad V(r) = \frac{\xi_n\, Z_1 Z_2\, e^2\, a_L}{2\, r^2} \quad , \qquad \xi_n = 0{,}8310 \quad ,$$

über das Lindhard und Scharff (1961) den energieunabhängigen nuklearen Energieverlust

$$(13) \qquad \left.\frac{dE}{dx}\right|_n^o = \frac{\pi^2\, e^2\, a_o\, Z_1\, Z_2\, N\, M_1 \left[Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right]^{-1/2}}{2{,}7183\,(M_1 + M_2)} \quad ,$$

allgemein als Standardenergieverlust bezeichnet, ableiten.

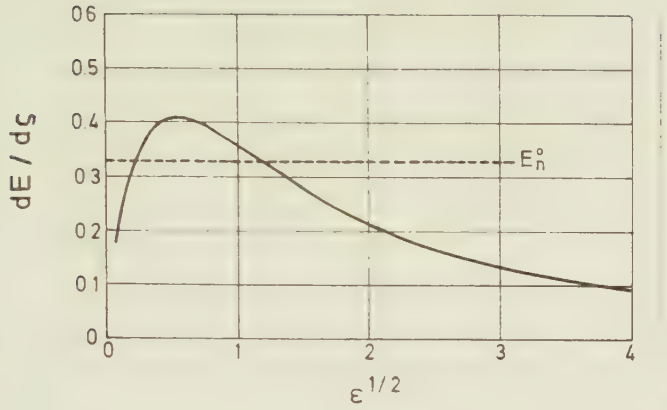


Abb. 1: Nuklearer Energieverlust nach der LSS-Theorie und nuklearer Standardenergieverlust $E_n^\circ$ in reduzierten Einheiten

Er ist in Abb. 1 nach der Darstellung von Lindhard, Scharff und Schiøtt eingetragen. Der Energiebereich dieser Arbeit liegt zwischen $0{,}08 \lesssim \varepsilon \lesssim 1{,}73$. Der Standardenergieverlust ist in Tab. 2 für Wasserstoff, Deuterium und Helium auf Gold eingetragen.

| | H | D | He |
|---|---|---|---|
| $\left.\frac{dE}{dx}\right\|_n^\circ$ $\left[eV/\text{Å}\right]$ | 0,15 | 0,30 | 1,15 |

Tab. 2: Nuklearer Standardenergieverlust für H, D und He.

Wie noch in Abschnitt 4.2 gezeigt wird, ist der nukleare Energieverlust bei der vorliegenden experimentellen Bestimmung klein gegen den elektronischen Energieverlust. Im betrachteten Energiebereich sind die Unterschiede im nuklearen Energieverlust sowohl der beiden hier besprochenen Theorien als auch bei anderen Energieverlustmodellen maximal 20 % bezüglich des Standardenergieverlustes. Eine ausführliche Darstellung der nuklearen Energieverlustmodelle findet sich in der Arbeit von Wilson, Haggmark und Biersack (1977).

## 2.2 Elektronischer Energieverlust

Dieser Abschnitt gibt einen Überblick über die Theorien des elektronischen Energieverlustes leichter Ionen, deren Geschwindigkeit v kleiner als $v_o$ ist.
In einem Metall lassen sich die Elektronen in zwei Klassen einteilen:

1. Die Rumpf- bzw. inneren Elektronen der Gitteratome, die durch die metallische Bindung relativ wenig beeinflußt sind und die etwa die gleiche räumliche Lokalisierung wie die Gitterionen besitzen.

2. Die Valenz- oder äußeren Elektronen, die die metallische Bindung bewirken und daher mit dem Ionengitter als Ganzem wechselwirken. Sie lassen sich in nullter Näherung durch ein freies entartetes Elektronengas (Fermigas) beschreiben.

Infolge der starken Lokalisierung der Rumpfelektronen muß deren Anregung eine starke Stoßparameterabhängigkeit zeigen. Bei Gold liegt die Rumpfgrenze etwa bei den 5s- und 5p-Elektronen (Hurd, 1975). Inwieweit die Näherung eines

freien Elektronengases, die sicher für die Valenzelektronen höheren Drehimpulses am problematischsten ist, für die Valenzelektronen zutrifft, wird in Abschnitt 4.2 diskutiert.
Der gesamte elektronische Energieverlust ist die Summe aus dem Rumpf- und Valenzelektronenverlust, also

$$\left.\frac{dE}{dx}\right|_e = \left.\frac{dE}{dx}\right|_r + \left.\frac{dE}{dx}\right|_v \quad . \tag{14}$$

Inwieweit die Rumpfanregung für den untersuchten Energiebereich eine Rolle spielt, kann man grob über das Bohrsche Adiabatenkriterium (Bohr, 1948) abschätzen: Dieses besagt, daß die Anregung eines Elektrons vom Zustand $E_a$ zum Zustand $E_e$ nicht möglich ist, wenn die Dauer des Stoßes wesentlich größer als die Reaktionszeit des Elektrons ist, d.h. wenn

$$\frac{b}{v} \gg \frac{\hbar}{E_e - E_a} \tag{15}$$

ist, wobei b der Stoßparameter des Ions ist. Daraus ergibt sich ein kritischer Stoßparameter

$$b_m = \frac{\hbar\, v}{E_e - E_a} \quad . \tag{16}$$

Es findet also keine Anregung eines Elektrons von $E_a$ nach $E_b$ für $b > b_m$ statt. In Tab. 3 sind für 20 keV Protonen auf Gold (die höchste in dieser Arbeit untersuchte Energie) die Stoßparameter $b_m$ für die äußeren Rumpfniveaus eines Goldatoms nach den Tabellen von Herman und Skillman (1963) eingetragen:

| Zustand | Bindungsenergie [eV] | $b_m$ f. Ionisierung [Å] |
|---|---|---|
| 3s | 2894 | 0,004 |
| 4f | 109 | 0,118 |
| 5p | 60,3 | 0,213 |
| 5d | 12,5 | 1,029 |

Tab. 3: Kritische Stoßparameter für die Ionisierung der äußeren Elektronen eines Goldatoms

Vergleicht man den kritischen Stoßparameter $b_m$ für die Ionisierung des 5p-Elektrons mit z.B. dem Stoßparameter $b = 0{,}5$ Å, der bei der Energie von 20 keV zu einer Ablenkung von etwa $1{,}2^\circ$ führt (Abb. 33), so sieht man, daß die Rumpfanregung für die starke Vorwärtsstreuung im Energiebereich dieser Arbeit keine Rolle spielt. Der Bereich großer Stoßparameter wird ja gerade bei der Energieanalyse der nahezu geradlinig durch das Target transmittierten Ionen erfaßt. Dieser Sachverhalt wird in Abschnitt 4.1 näher untersucht.
Es gilt also für den Energiebereich dieser Arbeit in guter Näherung

$$\left.\frac{dE}{dx}\right|_e = \left.\frac{dE}{dx}\right|_v . \qquad (17)$$

Für schwere Ionen können Rumpfanregungsprozesse in dem betrachteten Geschwindigkeitsbereich infolge der Überlappung der Atomhüllen des Projektils und der Targetatome (Resonanzprozesse) vermutlich nicht mehr vernachlässigt werden. Ein einfaches Modell für solche Vorgänge stellte Firsov (1959) auf. Er berechnet den Energieverlust des Ions aus dem Impulsübertrag der im Überlappungsgebiet der Atomhüllen wechselwirkenden Elektronen. Da diese Betrachtungsweise für langsame Protonen und Heliumionen physikalisch nicht sinnvoll ist, wird diese Theorie hier nicht näher erörtert.
Sämtliche anderen theoretischen Berechnungen des Energieverlustes leichter Ionen für Geschwindigkeiten kleiner als der Fermigeschwindigkeit basieren auf der Annahme eines freien entarteten Elektronengases als nullte Näherung für die Valenzelektronen eines Metalls.

Die erste theoretische Berechnung des Energieverlustes eines langsamen leichten Ions in einem Fermigas wurde von Fermi und Teller (1947) durchgeführt. Sie kamen zu dem Ergebnis, daß der differentielle Energieverlust des Ions

proportional zur Geschwindigkeit v des Ions ist, wenn $v \ll v_F$ gilt. Dabei ist

$$(18) \qquad v_F = \frac{\hbar}{m_e} \left[3 \pi^2 n\right]^{1/3}$$

die Fermigeschwindigkeit und n die Dichte des Elektronengases. Also

$$(19) \qquad dE/dx = k' v = k E^{1/2} ,$$

k und k' sind die Proportionalitätskonstanten. Folgende qualitative Betrachtung stammt ebenfalls von ihnen.

Betrachtet man die Bewegung eines Ions der Masse $M_1 \gg m_e$ mit einer Geschwindigkeit $v \ll v_F$ durch ein Fermigas, so wird in einem Stoß zwischen dem Ion und einem Elektron die Geschwindigkeitsänderung des Elektrons von der Größe v sein, für einen zentralen Stoß wäre sie gerade 2v. Wegen des Pauliprinzipes können jedoch nur diejenigen Elektronen angeregt werden, deren Geschwindigkeit nach dem Stoß über der Fermigeschwindigkeit liegt. Ihre Anzahl pro Einheitsvolumen beträgt

$$(20) \qquad \hat{n} \tilde{\propto} \frac{m_e^3 v_F^2 v}{\hbar^3}$$

Andererseits ist der Coulomb-Wirkungsquerschnitt von der Größe

$$(21) \qquad \sigma \tilde{\propto} \left[\frac{e^2}{m_e v_F^2}\right]^2$$

und die übertragene Energie von der Größenordnung

$$(22) \qquad T \tilde{\propto} m_e v_F v.$$

Aus (20), (21) und (22) folgt somit für den differentiellen Energieverlust

$$(23) \qquad \frac{dE}{dx} \approx \frac{T \sigma \hat{n} v_F}{v} \approx \frac{m_e^2 e^4 v}{\hbar^3} \quad .$$

Die Unabhängigkeit des Energieverlustes von der Elektronendichte n ist eine Folge der starken Abhängigkeit des Wirkungsquerschnittes von der Fermigeschwindigkeit ($1/v_F^4$). Die quantitativen Rechnungen ergeben, wie noch gezeigt wird, für den Fall hoher Elektronendichte daher eine sehr schwache Abhängigkeit des Energieverlustes von der Dichte.

Die quantitative Berechnung des mittleren Energieverlustes des Ions mittels der Bornschen Näherung führte Fermi und Teller zu dem Ergebnis

$$(24) \qquad \frac{dE}{dx} = \frac{2 m_e^2 e^4}{3 \pi \hbar^3} \; v \ln \frac{\hbar v_F}{e^2} \quad \text{für } Z_1 = 1.$$

Die Anwendung der Bornschen Näherung ist nur gerechtfertigt, solange

$$(25) \qquad \alpha := \frac{e^2}{\hbar v_F} << 1$$

gilt (Landau und Lifschitz, 1971).

Bedingung (25) ist gleichbedeutend mit der Forderung, daß sich in einem Würfel mit der Kantenlänge $a_o$ im Durchschnitt mehr als ein Elektron befindet, d.h. die Elektronendichte n muß größer als $6{,}7\,[\text{Å}^{-3}]$ sein. Beziehung (24) ist also nur für hohe Elektronendichten anwendbar. Tabelle 4 gibt einen Überblick über verschiedene Valenzelektronenzahlen N pro Atom, der daraus resultierenden Elektronendichten n und Fermigeschwindigkeiten $v_F$ sowie der entsprechenden $\alpha$-Werte:

| N | $n\left[1/\text{Å}^3\right]$ | $v_F\left[\text{Å}/\text{sec}\right]$ | $\alpha$ | Literatur |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 0,059 | $1{,}39 \cdot 10^{16}$ | 1,57 | Kittel (1969) |
| 3 | 0,177 | $2 \cdot 10^{16}$ | 1,06 | Jsaacson (1975) |
| 8,2 | 0,484 | $2{,}80 \cdot 10^{16}$ | 0,75 | Jsaacson (1975) |

Tab. 4: Elektronendichten, Fermigeschwindigkeiten und $\alpha$-Werte für verschiedene effektive Valenzelektronenzahlen

Die $\alpha$-Werte für typische Elektronendichten in freien Atomen liegen zwischen $0{,}03 < \alpha < 0{,}31$. Für $\alpha \gg 1$, d.h. für sehr niedrige Elektronendichten zeigten Trubnikov und Yavlinskii (1965), daß unter der Annahme eines abgeschirmten Potentials von der Form einer $\delta$-Funktion trotz Bedingung (25) die Bornsche Näherung noch angewandt werden kann. Sie erhalten hierfür folgenden Energieverlust:

$$(26) \qquad \frac{dE}{dx} = 10\, v\, \hbar\, n^{2/3}.$$

Die dimensionslose Größe $\alpha^2$ ist ein Maß für das Verhältnis zwischen der potentiellen ($e^2 n^{1/3}$) und kinetischen Energie ($m_e v_F^2$) zweier benachbarter Elektronen (Trubnikov und Yavlinskii, 1965, und Lindhard und Winther, 1964), d.h. für kleine $\alpha$, also sehr hohe Elektronendichten, ist die kinetische Energie groß gegen die potentielle Energie und das freie-Teilchen-Bild (Vernachlässigung der Wechselwirkung zwischen den Elektronen) ist eine gute Näherung. Für $\alpha \gg 1$ führten deshalb Trubnikov und Yavlinskii (1965) eine Rechnung unter Berücksichtigung der Elektronenkorrelation in Termen des Fermiflüssigkeitsmodells von Landau (Landau, 1957, Silin, 1959 und 1960) durch. Sie gelangten zu einem Ausdruck für den Energieverlust, der sich von (26) nur durch den Faktor $m_e^+/m_e$, $m_e^+$ ist die effektive Masse der Elektronen, unterscheidet.

Einen ganz anderen Weg beschritt Lindhard (1954), als er die Abbremsung eines schnellen geladenen Teilchens in einem Fermigas über dessen Polarisierung beschrieb. Der Energieverlust des Ions wird demnach durch die retardierte Kraft $Z_1 e\vec{E}_{ind}$ erzeugt, die eine Folge des über die Polarisierung des Elektronengases durch das Ion erzeugten elektrischen Feld $\vec{E}_{ind}$ ist, also (ausführliche Darstellung z.B. Bonderup, 1974)

$$(27) \qquad \frac{dE}{dx} = - Z_1 e \vec{E}_{ind}(\vec{R},t) \frac{\vec{v}}{v} \quad ,$$

$\vec{R}$ ist die Position und $\vec{v}$ die Geschwindigkeit des Ions zum Zeitpunkt t. Über diese Beziehung ist die Abbremsung des Ions mit den dielektrischen Eigenschaften des Fermigases, die die Dielektrizitätskonstante $\varepsilon(k,\omega)$ beschreibt, verknüpft. Diese Beschreibung wird als "Response-Theorie" bezeichnet. Die Lindhardsche Theorie geht dabei von der Näherung aus, daß die Störung der Ladungsverteilung des Fermigases durch das Ion klein ist. Dies bedeutet, daß die induzierten Felder linear in den äußeren Ladungs- und Stromdichten sind. Diese Näherung wird allgemein als "lineare Response-Theorie" bezeichnet. Eine Folge dieser Linearität zwischen Störung und induzierten Feldern ist die $(Z_1 e)^2$-Proportionalität des Energieverlustes. Diese Abhängigkeit ist auch ein Ergebnis der Betheschen Störungsrechnung für den Energieverlust schneller Teilchen (Bonderup, 1977, Sigmund, 1973). Im Grenzfall $v << v_F$ erhält Lindhard für den Energieverlust eines Ions

$$(28) \qquad \frac{dE}{dx} = \frac{4 Z_1^2 e^4 m_e^2}{3 \pi \hbar^3} v C_1(\chi) \quad .$$

$C_1(\chi)$, mit $\chi^2 = \frac{\alpha}{\pi}$, ist eine Funktion, die die Abhängigkeit des Energieverlustes von der Elektronendichte n beschreibt. Für $\chi^2 << 1$, also für sehr hohe Elektronendichten, ist $C_1(\chi)$ näherungsweise

$$C_1(\chi) \approx \frac{1}{2} \log \frac{h v_F}{e^2} \quad , \tag{29}$$

sodaß die Formel (28) in dieser Näherung mit der von Fermi und Teller (24) übereinstimmt.
Lindhard und Winther (1964) berechneten eine Näherung für $C_1(\chi)$ für $v/v_F \lesssim 1$:

$$C_1(\chi) \approx \frac{1}{2(1-\frac{\chi^2}{3})^2} \left[ \log \frac{1+2\frac{\chi^2}{3}}{\chi^2} - \frac{1-\frac{\chi^2}{3}}{1+\frac{2}{3}\chi^2} \right] . \tag{30}$$

Sie zeigten ferner, daß für Ionengeschwindigkeiten kleiner als $v_o$ der Energieverlust nur durch Einzelteilchenanregung des Elektronengases zustande kommt. Plasmonenanregung spielt erst für Geschwindigkeiten größer als $v_o$ eine Rolle. Dies wurde von Erginsoy (1965) und Ferrell und Ritchie (1977) bestätigt.
Ritchie (1959) und Trubnikov und Yavlinskii (1964) gelangten unter der Annahme, daß das Ion durch Dichtefluktuationen des Elektronengases exponentiell abgeschirmt ist, zu folgender Approximation für $C_1(\chi)$:

$$C_1(\chi) \approx \frac{1}{2} \left[ \log (1 + \frac{1}{\chi^2}) - \frac{1}{1+\chi^2} \right] . \tag{31}$$

Ferrell und Ritchie (1977) bezeichnen diese Näherung als "lineare Response-Theorie mit exponentieller Abschirmung".
Trubnikov und Yavlinskii (1964) berechnen numerisch unter Anwendung der quantenmechanischen Beziehung für die Dielektrizitätskonstante des Elektronengases einen etwa um 25 % höhere Werte für $C_1(\chi)$ als in (31).
Die Abschirmung der Kernladung von teilweise ionisierten Ionen durch die gebundenen Elektronen berücksichtigen

Ferrell und Ritchie (1977) in ihrer "allgemeinen linearen Response-Theorie". Sie gelangten unter Berücksichtigung der Bindung von Elektronen im exponentiell abgeschirmten Potential des Ions

$$v(r) = Z_1 \, e^{-\kappa r}/r \quad , \tag{32}$$

mit der Abschirmlänge

$$\kappa = 3 \, \alpha'/r_s^{1/2} \quad , \qquad \alpha' = \left[\frac{4}{9\pi}\right]^{1/3} \quad , \tag{33}$$

und

$$r_s = \left[\frac{3}{4\pi n}\right]^{1/3} \tag{34}$$

dem Wigner-Seitz-Radius, zu einem komplizierten, nur numerisch zu berechnenden Ausdruck für die Dielektrizitätskonstante $\varepsilon(k,\omega)$. Das Ergebnis dieser Rechnung für das $He^+$-ion ist in Abb. 2 (aus Ferrell und Ritchie) in Vergleich mit den Ergebnissen für Protonen und $He^{++}$ nach der linearen Response-Theorie mit exponentieller Abschirmung dargestellt. Es sind dort die jeweiligen k'-Werte als Funktion von $r_s$, beide in atomaren Einheiten (Energieeinheit = Hartree  Ry = 27,2 eV und Längeneinheit = $a_o$), aufgetragen.

Abb. 2 zeigt, daß für sehr große Elektronendichten die allgemeine lineare Response-Theorie für das $He^+$-Ion in die lineare Response-Theorie mit exponentieller Abschirmung für ein α-Teilchen übergeht. Dies liegt daran, daß für sehr hohe Dichten die Abschirmlänge $\kappa$ wesentlich kleiner als der Bahnradius des gebundenen Elektrons ist, sodaß die volle Kernladung des Ions für den Energieverlust verantwortlich ist. Der andere Extremfall kleiner Dichte ergibt in Abb. 2 einen Übergang der allgemeinen Theorie in die lineare Theorie mit exponentieller Abschirmung eines Protons. Hier ist der Bahnradius wesentlich kleiner als die Abschirmlänge des Elektronengases, sodaß das gebundene Elektron nahezu die volle Kernladung des Ions sieht. Dies führt für das $He^+$-Ion zu einer effektiven Ladung von der Größe der Protonenladung.

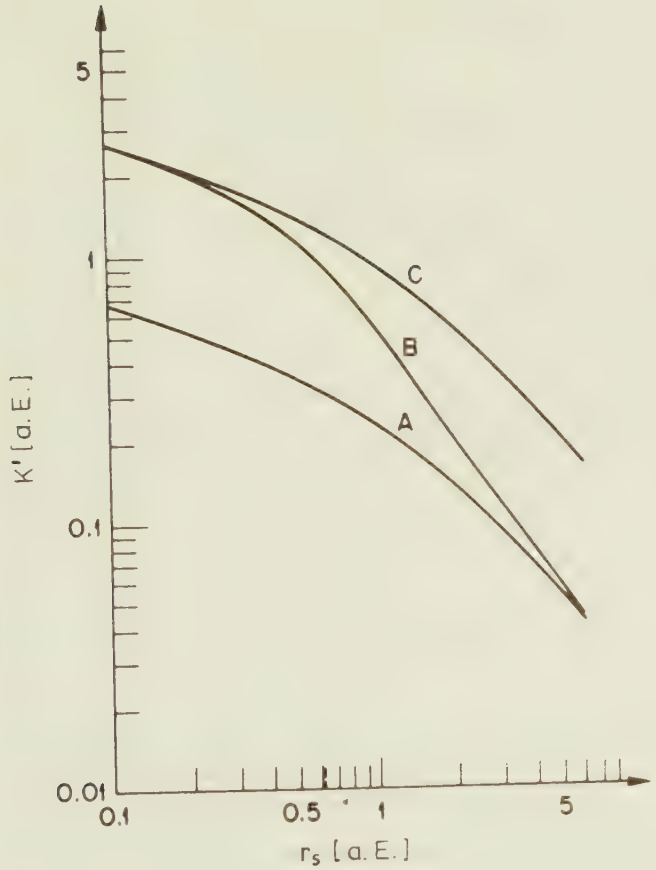


Abb. 2: Variation der Proportionalitätskonstanten k' als Funktion von $r_s$ für ein $He^+$-Ion nach der allgemeinen linearen Response-Theorie (Kurve B), für ein Proton (Kurve A) und für ein α-Teilchen (Kurve C) nach der linearen Response-Theorie mit exponentieller Abschirmung.

Für ein Proton zeigten Rogers, Graboske und Harwood (1970) die Problematik der Bindung eines Elektrons im Potential (32). Die Berücksichtigung von Austrittsarbeit (Callaway, 1959) und Austauschwechselwirkung (Isenberg, 1950) führen zu einer weiteren Abschwächung einer solchen Bindung. Ferrell und Ritchie (1977) berücksichtigten in ihrem Modell ein im Gegensatz zu (32) selbstkonsistentes Potential, wobei sie eine Bindung eines Elektrons an ein Proton im Metall nicht ausschließen können. Jedoch führten sie Einflüsse wie Abstreifung des Elektrons an den Ionenrümpfen und Austauschwechselwirkung zu der Ansicht, daß ein Modell, das diese Einflüsse berücksichtigt, zu keiner Bindung führen würde. Durch ähnliche Überlegungen kam auch Brandt (1975) zu diesem Ergebnis.
Wie schon angesprochen wurde, ist die Anwendung der Bornschen Näherung auf Metallvalenzelektronendichten problematisch. Eine verbesserte Berechnung des Energieverlustes besteht in der Phasenanalyse des Transportwirkungsquerschnittes

$$(35) \qquad \sigma_{tr} = \int d\sigma(1-\cos\Theta) = \frac{4\pi}{(m_e v_F)^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (\ell+1)\sin^2(\delta_\ell - \delta_{\ell+1}),$$

der auch der quantitativen Rechnung von Fermi und Teller zu Grunde liegt. $\Theta$ ist der Streuwinkel im Ruhesystem des Protons und $\delta_\ell$ die Phasenverschiebung der $\ell$-Partialwelle für die Streuung der Elektronen an der Fermioberfläche durch das abgeschirmte Potential des Protons. Ferrell und Ritchie (1977) berechneten damit über die Beziehung (Sigmund, 1973, Finnemann, 1968)

$$(36) \qquad \frac{dE}{dx} = n\, m_e\, v_F\, v\, \sigma_{tr}$$

numerisch den Energieverlust für ein Proton für $v << v_F$. In Abb. 3 (nach Ferrell und Ritchie) ist das Ergebnis dieser Rechnung (Kurve D) eingetragen. Als Vergleich sind hierzu

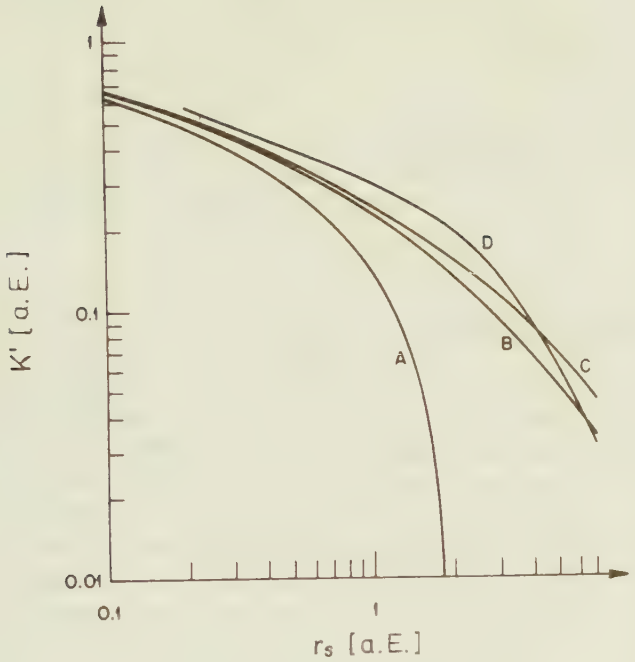


Abb. 3: Vergleich der Proportionalitätskonstanten k' als Funktion von $r_s$ für die verschiedenen Theorien für ein Proton. Kurve A zeigt das Ergebnis von Fermi und Teller, Kurve B zeigt das Ergebnis der linearen Response-Theorie mit exponentieller Abschirmung, Kurve C gibt das Ergebnis der allgemeinen linearen Response-Theorie wieder und Kurve D stellt die Ergebnisse der numerischen Integration der Phasenanalyse dar.

die lineare Response-Theorie mit exponentieller Abschirmung (Kurve B), die allgemeine lineare Response-Theorie (Kurve C) und die Fermi und Teller Theorie (Kurve A) eingetragen. Hier sind wieder die jeweiligen Proportionalitätskonstanten gegen $r_s$, beide in atomaren Einheiten, aufgetragen.

Eine sehr bekannte Formel wurde von Lindhard und Scharff (1961) ohne Herleitung und näherer physikalischer Erläuterung für den Geschwindigkeitsbereich $v < v_o \, Z_1^{2/3}$ publiziert, nämlich:

$$(37) \qquad \frac{dE}{dx} = \frac{8 \pi Z_1^{1/6} e^2 Z_1 Z_2}{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}} \cdot \frac{v}{v_o}$$

## 2.2.1 Energieverbreiterung

Infolge des statistischen Charakters des Energieverlustes eines Ions bei seiner Bewegung durch ein Fermigas unterliegen die möglichen Energieverluste einer Wahrscheinlichkeitsverteilung, deren wahrscheinlichster Wert der mittlere Energieverlust des Ions ist (siehe Def. 2.1). Unter der Annahme einer gaußförmigen Verteilung bestimmte Lindhard (1953, veröffentlicht 1954) die Standardabweichung $\Omega$ der Energieverlustverteilung (dE) (energy straggling), definiert in 2., zu

$$(38) \qquad \Omega^2 = \overline{(dE)^2} - (\overline{dE})^2 = \int_0^\infty d\omega p(\omega) \hbar^2 \omega^2$$

$p(\omega)d\omega$ ist die differentielle Wahrscheinlichkeit für den Energieübertrag $\hbar\omega$, $\omega$ ist die Frequenz dieses Energiequants. Für den Grenzfall sehr kleiner Ionengeschwindigkeiten, d.h. $v << v_F$, berechnet Lindhard aus (38) durch Anwendung der dielektrischen Theorie für den Durchschnittswert von der Standardabweichung $\Omega$ pro Energieverlust dE (relative straggling) folgende Approximation:

(39) $$\frac{\Omega^2}{dE} \approx \left[5\, m_e\, v^2\, \hbar\omega_o\right]^{1/2} ,$$

mit

(40) $$\omega_o = \left[\frac{4\pi\, e^2\, n}{m_e}\right]^{1/2}$$

als der Plasmafrequenz des Elektronengases.

## 2.3 Einfluß der Gitterführung auf den Energieverlust

Die Annahme einer statistischen Verteilung der Targetatome, wie sie bei den oben beschriebenen Theorien des Energieverlustes vorausgesetzt wurde, ist für die Bewegung eines Ions in einer niederinduzierten Kristallrichtung infolge der Kristallsymmetrie nicht mehr richtig. Wird das Ion in eine solche Richtung bzw. Ebene eingeschossen, so kommt es infolge des abstoßenden Charakters des Wechselwirkungspotentials und der regelmäßigen Anordnung der Targetatome zu einer aufeinanderfolgenden Serie von Kleinwinkelstößen, die zu einer oszillatorischen Bewegung des Ions zwischen den Ketten bzw. Ebenen führt. Dieser Vorgang heißt Gitterführung (channeling). Er wurde durch Robinson und Oen (1963) bei der Computersimulation der Abbremsung schneller Ionen in Kristallen entdeckt. Die erste experimentelle Bestätigung gelang Piercy, Brown, Davies und McCargo (1963) und Lutz und Sizmann (1963). Die erste analytische Beschreibung für den Spezialfall der Bewegung in der Nähe der Kanalaxe führten Lehmann und Leibfried (1963) durch. Eine umfassende theoretische Beschreibung des Gitterführungseffektes wurde von Lindhard (1965) gegeben. Die Grundlage der Theorie ist die approximative Beschreibung der Wechselwirkung von Projektil und Atomketten bzw. -ebenen durch ein Kontinuumspotential.

Dieses erhält man durch Superposition der Zweikörperpotentiale vom Typ (3) unter der Näherung, daß für Entfernungen r von einem Atom der Kette bzw. Ebene größer als einer kritischen Distanz $R_c$ sich nur mehr eine Abhängigkeit des Summenpotentials vom senkrechten Abstand zur Kette bzw. Ebene ergibt.
Für eine Atomkette <ijk> mit dem Atomabstand $d_{<ijk>}$ leitete Lindhard (1965) das Kontinuumspotential

$$(41) \quad U_{<ijk>}(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d_{<ijk>}} \ln\left[\frac{C a_L^2}{R^2} + 1\right] ,$$

R ist der radiale Abstand von der Kette, mit $C \approx 3$, ab. Diese Näherung ist gültig, wenn "die Streuung eines Ions im Punkte des kleinsten Abstandes von der Kette durch mehrere Atome verursacht wird". Dies bedeutet, daß das Produkt aus der Stoßzeit $\Delta t$ und der Geschwindigkeitskomponente des Ions parallel zur Kette $v \cos \Psi$ groß gegen den Abstand $d_{<ijk>}$ sein muß, also

$$(42) \quad \Delta t \, v \cos \Psi >> d_{<ijk>} ,$$

$\Psi$ ist der Winkel zwischen der Bahn des Ions und der Atomkette. Für Energien $E < E'$ ,

$$(43) \quad E' = \frac{2 Z_1 Z_2 e^2 d_{<ijk>}}{a_L^2} ,$$

für Protonen auf Gold beträgt E' = 454 keV, berechnet Lindhard den kritischen Winkel $\Psi_c^a$ , bei dessen Überschreitung die Kontinuumsapproximation ungültig wird, zu

$$(44) \quad \Psi_c^a = \left[\frac{C^2 a_L^2 Z_1 Z_2 e^2}{E d_{<ijk>}^3}\right]^{1/4} .$$

Für 2 keV Protonen auf Gold ist $\psi_c^a = 11{,}1^\circ$. Die Bewegung von Ionen mit $\psi \leq \psi_c^a$ (im Kontinuumspotential) wird als axiale Gitterführung (axial channeling) bezeichnet. Der kritische Abstand $R_c$ ist nach Sizmann und Varelas (1977) von der Größe

$$R_c \approx \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2 d}{E}\right]^{1/2} \qquad (45)$$

Für 2 keV Protonen auf Gold ist $R_c \approx 1$ Å, also wesentlich größer als der Abschirmradius $a_L$.
Schwächer und weniger wohl definiert ist das Kontinuumspotential und damit die Gitterführung an Atomebenen (planar channeling). Nach Lindhard (1965) ist das Ebenenpotential um den Faktor $2a_L/d_{(ikl)} = 0{,}1$ kleiner als das axiale Potential. Die kritischen Winkel sind somit etwa um drei- bis viermal kleiner als die axialen Winkel. Für einen kritischen Abstand $y_c \gtrsim a_L$ von der Ebene ist nach Lindhard die Kontinuumsnäherung für Energien $E > 90\ Z_1 Z_2^2$ eV anwendbar. Andererseits muß die Ausdehnung eines axialen bzw. ebenen Kanals d' der Bedingung

$$d' > 2R_c \qquad (46)$$

genügen, um eine Gitterführung zu ermöglichen. Daher ist für den unteren Energiebereich dieser Arbeit nur axiale Gitterführung in den offensten Kanälen möglich. Ein Spezialfall der axialen Gitterführung ist das sogenannte "Hyper- bzw. Proper-channeling", bei dem das Ion die Potentialbarriere $E_c \approx 5Z_1$eV (Lindhard, 1965) zum Nachbarkanal nicht überschreiten kann und somit in Kanal bleibt. Der kritische Winkel hierfür beträgt (Lindhard, 1965)

$$\psi_c^H \approx \left[\frac{E_c}{E}\right]^{1/2} . \qquad (47)$$

Für zwei keV Protonen auf Gold ist $\psi_c^H \approx 2{,}8^\circ$.

Zusammenfassend kann man also sagen, daß für gittergeführte Ionen eine untere Grenze $R_c$ für deren Stoßparameter existiert. Bei gleicher Energie ergibt Hyperchanneling die am weitesten von den Ketten verlaufenden Bahnen. Die Aus-

filterung kleiner Stoßparameter ergibt eine beträchtliche Verminderung des nuklearen Energieverlustes gittergeführter Ionen. So schätzen Sizmann und Varelas (1977) den differentiellen nuklearen Energieverlust für axiale Gitterführung zu

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n^g \approx \frac{M_1}{M_2} N \dot{d}^2 E \Psi^4 \qquad (48)$$

ab. Für einen Zweierstoß ist der Energieverlust für kleine Ablenkungen proportional zu $\Psi^2$. Der nukleare Energieverlust ist also für gittergeführte Ionen noch um Größenordnungen kleiner als für schwach abgelenkte Ionen in einem amorphen Target.

Komplexer ist der Einfluß des Gitterführungseffektes auf den elektronischen Energieverlust.
Der Energieverlust von Ionen in einem Fermigas ist natürlich stoßparameterunabhängig. Da dieses aber nur die nullte Näherung für die Valenzelektronen eines Metalls darstellt, sind in einem realen Kristall infolge der Wechselwirkung der Valenzelektronen mit dem Ionengitter doch Unterschiede im Energieverlust zwischen den Kristallrichtungen zu erwarten. Da die Elektronendichte der Valenzelektronen hohen Drehimpulses in der Nähe der Ionenrümpfe am größten ist, sollte der Energieverlust an diesen eine Stoßparameterabhängigkeit zeigen. Dies bedeutet eine erhebliche Erschwerung der theoretischen Beschreibung des elektronischen Energieverlustes, da erstens die Bahn des Ions in die Berechnungen eingeht, und zweitens die Ortsabhängigkeit der Valenzelektronendichte und damit die genauen Radialwellenfunktionen bekannt sein müßte.
Für einen Polykristall ist eine Mittelung über die Dichtebereiche der einzelnen Kristallite, die vom Ion durchlaufen werden, zu erwarten. Dies führt zu einem erhöhten Energieverlust im Vergleich zu einer niederinduzierten Richtung. Die gleichen Argumente gelten auch für das Energiestraggling, das ebenfalls nach (39) elektronendichteabhängig ist.

# 3. Experimenteller Teil

## 3.1 Apparatur

Die Messungen wurden an der Apparatur "Bombardon" (Eckstein und Verbeek, 1973) durchgeführt. Sie ist in Abb. 4 schematisch dargestellt.

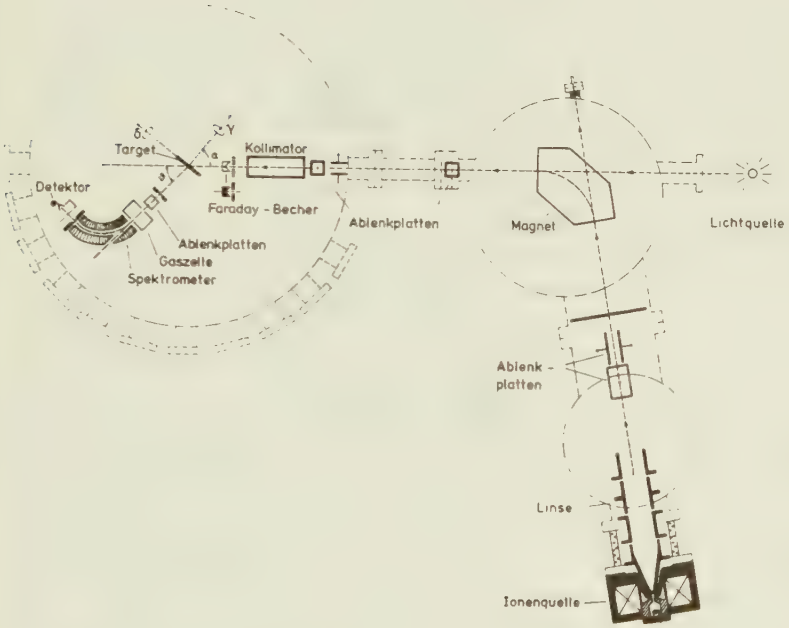


Abb. 4: Schematische Darstellung der Apparatur BOMBARDON

Die in einer Duoplasmatron-Ionenquelle erzeugten Ionen gelangen über einen Magneten zur Massenanalyse in die Streukammer. Der Primärenergiebereich erstreckt sich von 1 bis 20 keV. Die Streukammer wird durch eine Turbomolekularpumpe (480 L/sec.), Ionengetterpumpen (1000 L/sec.) und einer Titansublimationspumpe (20 000 L/sec. für H) evakuiert. Ohne Ausheizen wird ein Druck von etwa $10^{-9}$ Torr erreicht, der bei Gaszellenbetrieb auf etwa $10^{-7}$ Torr ansteigt. Die Streu- und Analysieranordnung ist auf dem Deckelflansch der Streukammer untergebracht. Sie besteht aus dem Kollimator, dem Targetmanipulator und dem Energie- und Nachweissystem. Die Divergenz des Ionenstrahls wird durch die Ein- und Ausgangsblende des Kollimators bestimmt. Dieser ist so ausgelegt, daß der Brennfleck auf dem Target etwa die Größe der Austrittsblende besitzt. Für die vorliegenden Messungen betrug der Durchmesser der Austrittsblende 0,3 mm. Die Divergenz des Ionenstrahls ist damit $0{,}3^{\circ}$. Vor dem Target kann ein Faradaycup zur Bestimmung der auf das Target treffenden Ladung eingefahren werden. Zur Unterdrückung der durch den Ionenbeschuß entstehenden Sekundärelektronen wird die Eingangsblende des Cups auf eine Spannung von -80 Volt gelegt.

Für die Messung der Transmission von Ionen durch die Goldfilme wurde ein Targethalter gebaut, der einen Ein- und Austrittswinkelbereich von $\pm 55^{\circ}$ bezüglich der Mittelachse ermöglichte. Dadurch ist eine Analyse der durch die Goldfilme transmittierten Teilchen ohne Beeinflussung durch die Targethalterung möglich. Abbildung 5 zeigt ein Foto des Targethalters. Mit dem Targetmanipulator kann ein Target um drei zueinander senkrechte Achsen, deren Schnittpunkt etwa auf der Targetmitte liegt, gedreht werden. Die drei Drehwinkel mit den entsprechenden Drehachsen sind in Abb. 4 eingezeichnet. In Abb. 5 sind die entsprechenden Kipphebel gekennzeichnet. $\alpha$ ist der Drehwinkel um die auf der Meßebene senkrecht stehende Achse. Die Meßebene ist

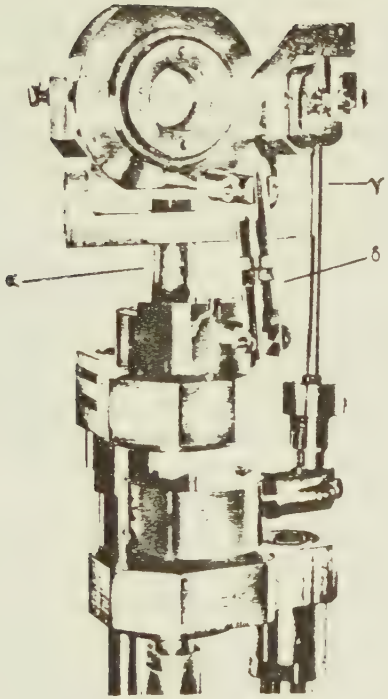


Abb. 5: Targethalter

durch die Geraden Detektor-Target und Target-Kollimator definiert. In Abb. 4 entspricht sie der Zeichenebene. Der Winkel α zwischen Strahlrichtung und Targetnormalen wird als Eintrittswinkel bezeichnet. Der Winkel γ entspricht einer Drehung um die zur Targetnormalen parallele Achse, die durch die Targetmitte geht. Sie liegt in der Zeichenebene in Abb. 4. Der Winkel δ entspricht einer

Drehung um die Drehachse, die auf den beiden anderen senkrecht steht. Die Winkelbereiche für die drei Drehungen betragen: $\alpha = \pm 55^{\circ}$, $\gamma = \pm 10^{\circ}$, $\delta = \pm 9{,}5^{\circ}$.
Hinter der Targethalterung befinden sich zwei Ablenkplatten, die beim Anlegen einer Spannung die vom Target kommenden geladenen Teilchen aus dem gestreuten Strahl ablenken. Dies ist für die Analyse der neutralen Teilchen wichtig. Nach den Ablenkplatten kommt die Gaszelle, in der die neutralen Teilchen für die elektrostatische Energieanalyse ionisiert werden. Die Gaszelle hat eine Länge von 40 mm. Die Ein- und Austrittsöffnungen haben eine Größe von $0{,}5 \times 1{,}4$ mm$^2$ bzw. $1{,}3 \times 2{,}5$ mm$^2$. Die Eintrittsöffnung legt den Raumwinkel des Detektors auf $5{,}49 \times 10^{-5}$ Sr fest. Der Gaszufluß erfolgt über ein auf dem Deckelflansch befestigtes automatisches Gaseinlaßventil mittels eines Metallschlauches zur Gaszelle. Ein Kapazitätsmanometer am Einlaßventil mißt den Druck für die Regelautomatik.
Die Energieanalyse der aus der Folie austretenden transmittierten Teilchen erfolgt durch einen $90^{\circ}$ Zylinderkondensator. Die Zylinderschalen bestehen aus in Richtung des Krümmungsradius der Sollbahn angeordneten scharfkantigen Klingen (Abb. 4) zur Verminderung der Streuung am Spektrometer. Durch eine Öffnung in der äußeren Schale in der Strahlrichtung kann der neutrale Anteil des Strahls den Spektrometer verlassen. Dies verhindert die Streuung der neutralen Teilchen im Spektrometer. Zum Nachweis der energieanalysierten Teilchen dient ein Kanalelektronenvervielfacher (CEM). Um eine Nachweiswahrscheinlichkeit von 1 (Crandall, 1975) zu erhalten, müssen die positiven Ionen durch -3 keV und die negativen Ionen durch 2 keV nachbeschleunigt werden. Der Neutralteilchenanalysator befindet sich zur Unterdrückung des Untergrundes in einem Metallgehäuse. Er kann in der Meßebene um die Targetmitte geschwenkt werden. So ist die Messung bei Austrittswinkel $\vartheta$ im Bereich $0^{\circ} \leq \vartheta \leq 155^{\circ}$ möglich. Der Austrittswinkel $\vartheta$ ist der Winkel zwischen Strahl-

richtung und der Achse Targetmitte-Detektor (siehe Abb. 4). In einigen Versuchen wurde ein anderer Deckelflansch mit einem schwenkbaren Kugelkondensator ohne Gaszelle verwendet. Dessen Öffnungswinkel beträgt 3,5 x $10^{-3}$ Sr. Hinter seinem Neutralteilchenaustritt in der äußeren Schale wurde ein Hochstrom-CEM, mit dem bis zu $10^{6}$ Pulse/sec. gezählt werden können, befestigt, sodaß eine schnelle Ausrichtung ohne Energieanalyse möglich ist.

### 3.1.1 Gewinnung der Meßdaten

Das Blockschaltbild in Abb. 6 zeigt den Aufbau der Meßelektronik. Der CEM wurde am Eingang mit einer Spannung $U_E$ = - 3 keV und am Ausgang mit $U_A$ = 0 keV für den Nachweis

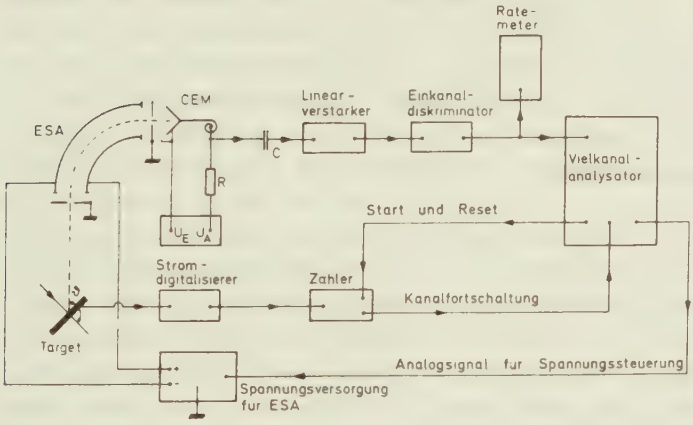


Abb. 6: Blockschaltbild der Meßelektronik (ESA = Elektrostatischer Energieanalysator)

positiver Teilchen und mit $U_E$ = 2 keV bzw. $U_A$ = 5 keV für den Nachweis negativer Teilchen betrieben. Die am CEM-Ausgang anfallenden Pulse werden über einen Linearverstärker und einen Einkanaldiskriminator zur Rauschunterdrückung zum Vielkanalanalysator geführt. Der digitalisierte Targetstrom steuert die Kanalfortschaltung des Vielkanalanalysators über einen Zähler, auf der die gewünschte Ladungsmenge pro Kanal eingestellt wird. Die Spannung am elektrostatischen Spektrometer wird durch ein zur Kanalnummer proportionales Analogsignal des Vielkanalanalysators in vorwählbaren Schritten gesteuert. Damit erhält man eine Normierung des Kanalinhaltes auf die eingeschossene Ladung und eine Proportionalität der Kanalnummer zur Energie der analysierten Teilchen. Letztere wird durch die Energieeichung bestimmt. Hierzu wird das Target aus dem Ionenstrahl gekippt und der Detektor an die Stelle $\vartheta = 0^\circ$ gesetzt. Die Energieanalyse des direkten Strahls liefert nun für jede Primärenergie infolge der endlichen Auflösung des Spektrometers eine gaußförmige Energieverteilung mit dem Maximum bei der Primärenergie. Die Halbwertsbreite dieser Verteilung ist die experimentell bestimmte Auflösung $\Delta E$ für die Primärenergie E. Für den Neutralteilchenanalysator ergab sich eine Auflösung von $\Delta E/E$ = 0,019 und für den Kugelkondensator eine Auflösung von $\Delta E/E$ = 0.007. Die Zuordnung von Primärenergie zur Kanalnummer des Maximums ergibt die Energieeichung des Vielkanalanalysators.

Die mit der beschriebenen Anordnung erhaltenen Energieverteilungen der durch das Target transmittierten Teilchen sind noch unter Berücksichtigung der Ionisationswahrscheinlichkeit $\eta_k$ der Gaszelle für die neutralen Teilchen und der Spektrometerauflösung $A = \Delta E/E = \Delta k/k$ zu korrigieren. Diese Korrektur erfolgt für jeden Kanal k nach folgender Beziehung: $N'_k = N / A\, k\, N_o\, \eta_k$.

$N_k$ ist die Zahl der gemessenen Teilchen im Kanal k, $N_o$ die Zahl der Primärteilchen pro Kanal, und k die Zahl der

Kanäle pro Spektrum. $N_o$ wird unter Berücksichtigung des Sekundärelektronenkoeffizienten,der mit dem Faradaycup ermittelt wurde, aus dem Targetstrom bestimmt. Ferner wird die Verschiebung des Spektrums der Neutralen infolge des Ionisationsenergieverlustes der Neutralen in der Gaszelle, die für Wasserstoff 13,6 eV und für Helium 24,5 eV beträgt, berücksichtigt. Die Umladewahrscheinlichkeit $\eta_k$ der Gaszelle, gegeben durch das Verhältnis der ionisierten Teilchen $N^+$ zu der Zahl der in die Gaszelle eintretenden Neutralteilchen $N^{Tot}$ wurde durch Vergleich mit einem älteren Neutralteilchenanalysator, für den bereits mittels einer Eichapparatur eine Eichkurve bestimmt wurde, ermittelt (Verbeek, Eckstein und Bhattacharya, 1980). Da es in dieser Arbeit nicht auf eine Absolutmessung der Intensitäten der neutralen Teilchen ankam, wird auf die Problematik des Neutralteilchennachweises nicht näher eingegangen.

Eine Schwierigkeit der Messungen bestand darin, daß bei höheren Primärenergien die Transmission durch die dünnen Goldfilme so anstieg, daß der CEM (max. 10 000 Pulse/sec.) übersteuert wurde. Einer Drosselung des Primärstroms war aber durch die untere Meßgrenze für den Targetstrom von etwa $3 \times 10^{-10}$ A begrenzt. So konnte der Energieverlust bei den dünnen Filmen (etwa 600 Å) nur unter $E_o$ = 12 keV und bei den dicken Filmen (etwa 1200 Å) nur über $E_o$ = 4 keV bestimmt werden.
Vor dem Einbau des Targets erfolgte eine Ausrichtung von Kollimator, Targethalterung und Spektrometer bei $\vartheta = 0^c$ mit Hilfe eines Gaslasers. Durch die geringe Abweichung von maximal $0{,}2^o$ der <100>-Richtung der Targets von ihrer Oberflächennormalen war eine Ausrichtung bezüglich <100> nicht erforderlich. Dies wurde natürlich durch kleine Veränderungen der Winkel $\alpha$ und $\delta$ hinsichtlich einer maximalen Intensität im Detektor unter dem Winkel $\vartheta = 0^o$ überprüft. Eine definierte Lage des Kristalls bezüglich der Meßanordnung wurde durch eine Drehung des Targets um den Winkel

$\alpha = 45^{\circ}$ und anschließender Einstellung des azimutalen Winkels $\gamma$ auf die größte Intensität im Detektor bei $\vartheta = 0$ erreicht.
Durch die Begrenzung der azimutalen Drehung wurde das Target bereits so eingebaut, daß die <010> Kante der einkristallinen Filme bereits nahezu parallel zur Meßebene lag. Die Genauigkeit der Winkeleinstellung am Targetmanipulator beträgt etwa $0{,}5^{\circ}$. Sie ist somit nach Abschnitt 2.3 etwa eine Größenordnung kleiner als die kritischen Winkel für axiale Gitterführung von Protonen in Au <100>.

## 3.2 Targets

### 3.2.1 Herstellung der Targets

Die Messungen wurden an ein- und polykristallinen Goldfilmen im Dickenbereich von 500 bis 1200 Å durchgeführt. Die polykristallinen Filme wurden durch Aufdampfen von 99,999 %igem Gold auf mit Lensodel AB6 beschichteten Glasträgern hergestellt. Die aufgedampften Schichten wurden in destilliertem Wasser abgelöst. Die Herstellung der einkristallinen Filme erfolgte im Kristalllabor des Instituts für Festkörperforschung der KFA Jülich. Hierzu wurde ein Verfahren angewandt, das von Bassett und Pasley (1959) entwickelt wurde. Es besteht darin, daß auf gereinigte einkristalline Kochsalzflächen Silber in Dicken von 1000 bis 2000 Å aufgedampft wird. Diese orientierten Silberfilme dienen als Substrat für das epitaktische Aufwachsen von Gold. Dadurch erhält man außerordentlich homogene Goldfilme.
Das Aufbringen der einkristallinen Goldfilme auf die Targetträgerringe erfolgte nach der von Noggle (1972) entwickelten Technik. Hierzu wurde auf Messingringen mit dem

Durchmesser 35 mm ein dünner Kollodiumfilm aufgebracht. Nach der Trocknung dieses Films wurde nun das Kristallsystem Au-Ag-NaCl auf diesen aufgelegt, sodaß Au die erste Schicht auf dem Kollodium bildete. Ein Vorteil des Kollodiumfilms besteht darin, daß er durch Acetondampf zum Schrumpfen gebracht und durch Entfernen aus dem Dampf wieder gespannt werden kann. Durch diesen Vorgang erhält man ein sehr glattes Anhaften des Goldfilms an den Kollodiumfilm. Anschließend entfernt man das NaCl durch Ablösen mit destilliertem Wasser. Die Silberschicht wird durch konzentrierte Salpetersäure aufgelöst. Nach Reinigen mit destilliertem Wasser wird der zurückgebliebene Goldfilm getrocknet.
Die polykristallinen Goldfilme wurden nach Ablösen in Wasser mit dem Kollodiumfilm aufgefangen und getrocknet und anschließend wie die einkristallinen Filme behandelt.

Zum Einbau der Goldfilme in den Targethalter wurden die Kollodiumfilme mit den darauf haftenden Goldfilmen mittels einer Handpresse auf Goldscheiben mit einem äußeren Durchmesser von 10 mm und einem inneren Durchmesser von 3 mm gepreßt. Zur Ablösung des auf der Goldscheibe oben liegenden Kollodiumfilms und zur Ausheilung von Gitterdefekten bei den einkristallinen Targets wurden die Filme bei 700$^{C}$ K an Luft ausgeheizt.
Die Herstellung der einkristallinen Goldfilme ist eine außerordentlich schwierige und noch nicht verstandene Prozedur. Von den hergestellten Filmen zeigten etwa nur 1 % sehr gute kristalline Eigenschaften. Von diesen wurden wiederum beim Aufbringen auf die Träger und beim Tempern etwa 90 % zerstört.

3.2.2 Targetcharakterisierung

Nach Bassett und Pasley (1959) zeigen die nach dem oben beschriebenen Verfahren hergestellten Filme im Transmissions-Elektronenmikroskop keine planaren Defekte wie Mikrotwins und Stapelfehler. Die Dichte der Versetzungen ist jedoch größer als in massivem Gold und beträgt etwa $10^{10}/cm^2$.
Die kristalline Qualität der Filme wurde nach der Herstellung in Jülich dort durch Aufnahme von Rocking-Kurven mit einem Doppelkristallspektrometer und von Laueaufnahmen überprüft. Für die verwendeten Filme betrug die Halbwertsbreite der Rockingkurven 12 Minuten. Abbildung 7 zeigt eine Laueaufnahme eines 1100 Å dicken <100> Goldfilms, die die gute Qualität der Einkristalle demonstriert. Aus den Laueaufnahmen ergab sich eine maximale Abweichung der <100>-Richtung von der Oberflächennormalen der Filme

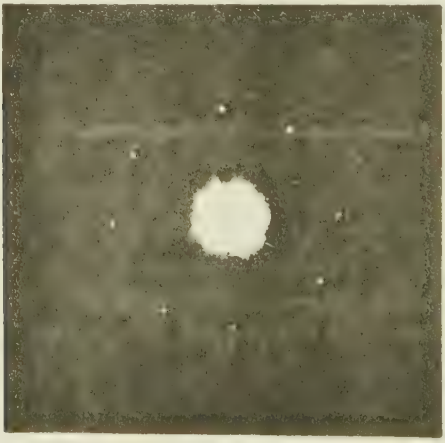

Abb. 7: Laueaufnahme eines 1100 Å dicken einkristallinen Goldfilms mit der Orientierung <100>

von $0{,}2^{\circ}$. Um zu sehen, wie gut die polykristallinen Filme den amorphen Fall annähern, wurden sie im Rasterelektronenmikroskop untersucht. In Abb. 8 ist die Aufnahme eines 590 Å dicken polykristallinen Goldfilms zu sehen. Die Vergrößerung beträgt 20 000. Aus der Abb. 4 kann man einen mittleren Korndurchmesser von etwa 500 Å abschätzen. Die

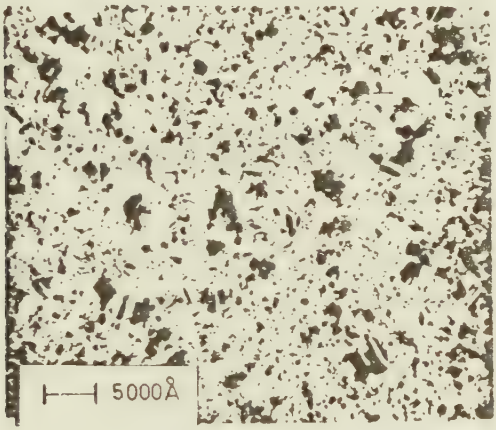


Abb. 8: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme eines 590 Å dicken polykristallinen Goldfilms (Vergrößerung 20 000)

Laueaufnahme dieses Films zeigt Abb. 9. Die gute Güte der Filme zeigt auch die Tatsache, daß sämtliche verwendeten Filme im Energiespektrum keine Intensität bei der Primärenergie zeigten, also "pin-hole" frei waren.

Abb. 9: Laueaufnahme eines 590 Å dicken polykristallinen Goldfilms

### 3.2.3 Dickenbestimmung der Targets

Die Dickenbestimmung der Goldfilme erfolgte durch Rutherford-Rückstreuung von 1150 keV $He^4$ unter einem Streuwinkel von $165^{\circ}$. Damit kann man auf zwei Arten die Dicken des Films bestimmen:

1) Bestimmung der Dicke über die Energiedifferenz $\Delta E$ der an der Vorder- und Rückseite zurückgestreuten Ionen. Hierzu ist die Kenntnis des differentiellen elektronischen Energieverlustes $dE/dx$ der He Ionen bei 1150 keV nötig. Dieser wurde aus den semiempirischen Tabellen von Ziegler und Chu (1974) entnommen. Diese Werte sind im Vergleich mit anderen experimentellen und theoretischen Arbeiten auf etwa 10 % genau (Mayer, Rimini, 1977). Denselben Fehler hat dann die Dickenmessung.

2) Bestimmung der Dicke über die Fläche des Rückstreuspektrums. Hierzu ist die Kenntnis der absoluten Zahl der einfallenden Teilchen, der Wirkungsquerschnitt und der Raumwinkel des Detektors erforderlich. Der Fehler dieser Methode ergibt sich im wesentlichen durch die Ungenauigkeit von 10 % in der Bestimmung der einfallenden Teilchenzahl. Er beträgt also ebenso wie bei Methode 1) etwa 10 %.

Die Bestimmung der Dicke der aufgedampften Goldschicht bei der Herstellung mittels eines Schwingquarzes ist wesentlich ungenauer. Aus dem Vergleich mit den RBS-Werten ist der Fehler dieser Methode etwa 30 %.
Ein Vorteil der Rutherford-Methode ist, daß die Dickenbestimmung an den Folien erfolgte, die für die Energieverlustmessungen verwendet wurden. Die Messung der Dicken an parallel erzeugten Filmen bzw. an einem anderen Bereich des hergestellten Films kann zu erheblichen Dickenfehlern infolge der Dickeninhomogenitäten über große Aufdampfbereiche führen. Auf diesen Punkt wird noch beim Vergleich mit Messungen anderer Autoren hingewiesen.

## 3.3 Meßergebnisse

### 3.3.1 Form der Energieverteilungen

Es wurden Energieverteilungen für $H^+$, $D^+$ und $He^+$-Ionen mit Primärenergien $E_o$ im Bereich von 2 - 20 keV nach der Transmission durch ein- und polykristalline Goldfilme der Dicken 500 - 1200 Å gemessen. Dabei wurden die geladenen und für einige Filme auch die neutral austretenden Teilchen analysiert. Für ausgewählte Primärenergien wurden außerdem Energieverteilungen als Funktion des Aus- ($\vartheta$) bzw. Eintrittswinkels ($\alpha$) aufgenommen.

Ein wichtiger Punkt dieser Arbeit ist die Frage, ob das Spektrum der positiv austretenden Teilchen für die Bestimmung des Energieverlustes genügt. In Abb. 10 ist stellvertretend für alle Energien und Targetarten das Spektrum der positiv und neutral austretenden Teilchen für 6 keV Protonen eingeschossen in die <100> Richtung eines 620 Å dicken Goldfilms abgebildet. Diese Abbildung demonstriert das wichtige Ergebnis:

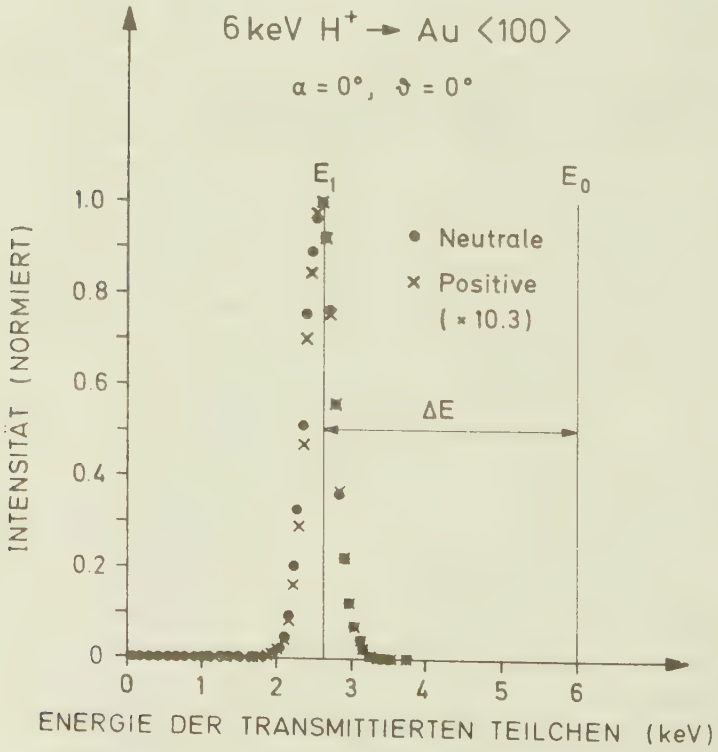


Abb. 10: Energieverteilung von 6 keV Protonen nach der Transmission durch einen 620 Å dicken einkristallinen Goldfilm in <100> Richtung. $\alpha = 0^{\circ}$ und $\vartheta = 0^{\circ}$. ( o) ist das Spektrum der neutral und (x) das Spektrum der positiv austretenden Teilchen.

Für den Fall der Energieanalyse in Einschußrichtung der Ionen ist das Maximum der Energieverteilung der geladen und neutral austretenden Teilchen innerhalb der Fehlergrenzen bei der gleichen Energie. Dies zeigte sich sowohl bei den Messungen an einkristallinen als auch an polykristallinen Targets. Der Fehler bei diesem Vergleich liegt in der Unsicherheit der Lage des Maximums der Energieverteilungen, die maximal 130 eV beträgt, und in der durch die Auflösung bedingten Unsicherheit in der Energiemessung, die maximal 180 eV beträgt. Dies ergibt einen Gesamtfehler von 2 % bezüglich der Bestimmung des Maximums.
Das Verhältnis der positiven zu den neutralen Teilchen ist etwa 1 : 10,3. Eine Abhängigkeit dieses Verhältnisses von der Energie und der Kristallrichtung wurde beobachtet. Da die Neutralisation der Projektile durch Oberflächenverunreinigungen wesentlich beeinflußt wird (Bhattacharya et al., 1980) und diese nicht untersucht wurden, ist es nicht sinnvoll, hier auf diesen Problemkreis näher einzugehen. Eine Verschiebung des Maximums und eine Formänderung der Energieverteilungen infolge des Ionenbeschusses bei den Messungen wurde nicht beobachtet. Dies ist auf die niedrige Beschußdosis, die im Mittel etwa $10^{11}$ Teilchen/cm$^2$ betrug, zurückzuführen. Eine Abtragung von einer Monolage Gold würde bei einer Zerstäubungsausbeute von $10^{-2}$ für den senkrechten Einschuß von Protonen auf Gold (Roth et al., 1979) eine Dosis von $3{,}5 \cdot 10^{17}$ Protonen/cm$^2$ erfordern.
Der Einfluß der Energieabhängigkeit der Neutralisation ist in Abb. 11 zu sehen. Sie zeigt für den Einschuß von 6 keV Protonen in die <100>-Richtung eines 620 Å dicken Goldfilms die Energieverteilungen der neutral und positiv unter $\vartheta = 20^{\circ}$ austretenden Teilchen. Der niederenergetische Teil des Spektrums der neutralen Teilchen liegt deutlich über dem entsprechenden Teil des Spektrums der positiven Teilchen. Durch die Normierung der Spektren auf das Intensitätsmaximum erhält man einen direkten Vergleich zwischen der maximalen Intensität und den Intensitäten bei den

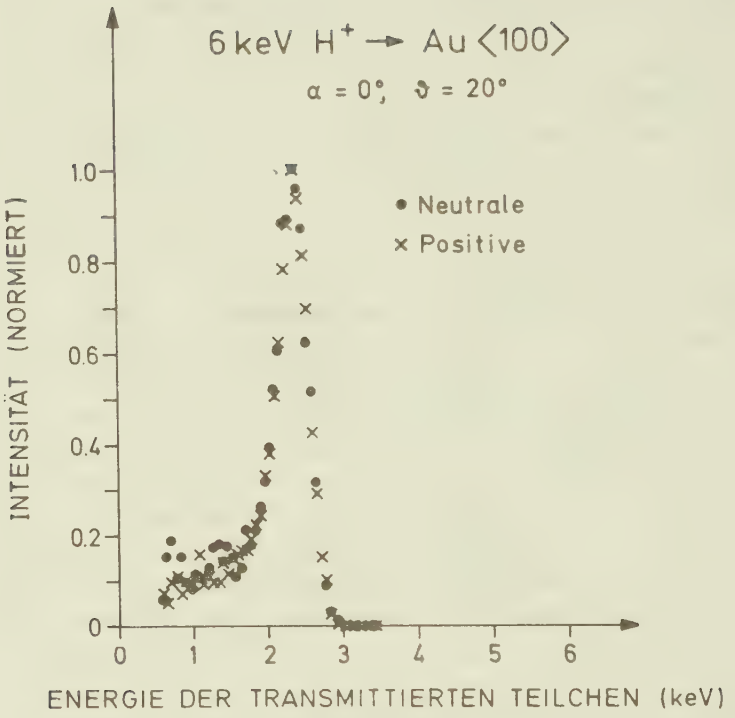


Abb. 11: Energiespektrum der neutral (.) und der positiv (+) unter $\vartheta = 20^{\circ}$ austretenden Wasserstoffteilchen. Der Einschuß von 6 keV Protonen erfolgte in die <100>-Richtung ($\alpha = 0$) eines 620 Å dicken einkristallinen Goldfilms. Beide Spektren sind auf das Intensitätsmaximum normiert.

niedrigeren Energien für beide Spektren. Die bei Protonen auch auftretenden negativen Ionen zeigen die gleiche Energieverteilung wie die positiven Ionen. Ihre Anzahl beträgt im untersuchten Energiebereich etwa 50 % der Positiven.

In Abb. 12 ist am Beispiel der Primärenergien $E_o$ = 4 keV und $E_o$ = 16 keV von Protonen für den Einschuß in die <100>-Richtung von Goldfilmen und der Energieanalyse unter $\vartheta = 0^o$ der Einfluß der Primärenergie auf die Energieverteilungen der insgesamt aus dem Target austretenden Teilchen, d.h. der Summe der neutralen, positiven und negativen Teilchen, demonstriert. Charakteristisch ist, daß für beide Primärenergien eine gaußförmige Energieverteilung auftritt und daß die Breite der Energieverteilung für die kleinere Energie schmäler ist.

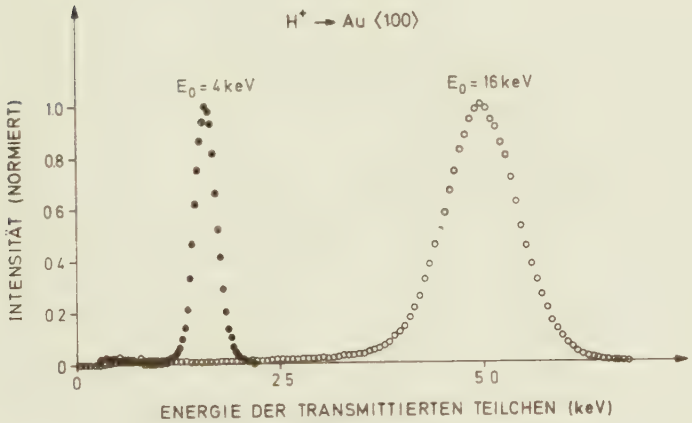


Abb. 12: Energieverteilungen der insgesamt aus dem Target austretenden Teilchen für den Einschuß von Protonen der Primärenergien $E_o$ = 4 keV und $E_o$ = 16 keV in die <100>-Richtung von Goldfilmen. $\alpha = 0^o$ und $\vartheta = 0^o$. Die Spektren sind jeweils auf das Intensitätsmaximum normiert.

Abbildung 13, die den Einfluß der Primärenergie auf die Spektren von Protonen für die Transmission durch ein polykristallines Target der Dicke 590 Å demonstriert, zeigt, daß diese Spektren eine mit fallender Energie wachsende niederenergetische Schulter aufweisen. Die Zahlen in Klammern unter den Primärenergiewerten geben das Verhältnis der maximalen Intensität des Spektrums für $E_o$ = 15 keV zu den entsprechenden maximalen Intensitäten der anderen Spektren an. In Abb. 12 sind keine Intensitätsverhältnisse angegeben, da beide Spektren mit verschiedenen Filmen gemessen wurden, die ein Dickenverhältnis von etwa 1 : 2 hatten.

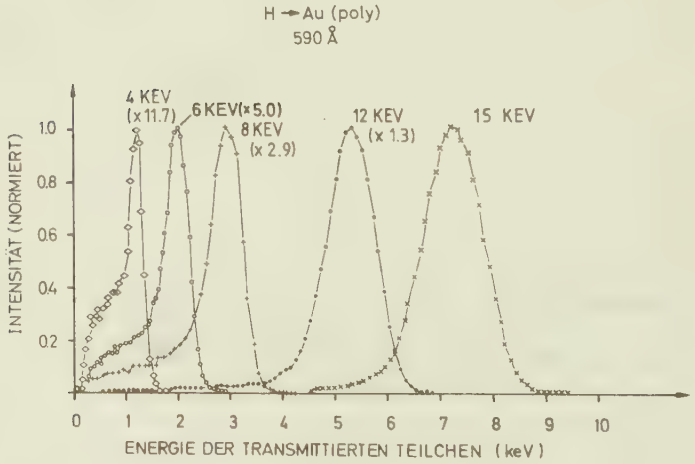


Abb. 13: Energieverteilungen von Protonen nach der Transmission durch einen 590 Å dicken polykristallinen Goldfilm für die Primärenergien $E_o$ = 4, 6, 8, 12 und 15 keV. $\alpha = 0^\circ$ und $\vartheta = 0^\circ$. Die Spektren sind auf das Intensitätsmaximum normiert.

Die Änderung der Energieverteilung bei Analyse unter $\vartheta = 0°$ demonstriert Abb. 14. Sie zeigt die Energieverteilungen der insgesamt aus dem Target austretenden Teilchen für den Einschuß von 18 keV Protonen in die <100>-Richtung eines 1200 Å dicken Goldfilms für die Austrittswinkel $\vartheta = 0°$ und $\vartheta = 20°$. Die Intensität im Maximum bei $\vartheta = 20°$ ist um den Faktor 14,3 kleiner als bei $\vartheta = 0°$. Das Verhältnis der Intensität im Maximum zu den Intensitäten im niederenergetischen Teil des Spektrums ist bei $\vartheta = 20°$ wesentlich kleiner als bei $\vartheta = 0°$. Jedoch ist die absolute Intensität im niederenergetischen Teil bei $\vartheta = 20°$ nur geringfügig höher als bei $\vartheta = 0°$. Außerdem ist das Maximum um etwa 690 eV zu kleineren Energien hin verschoben.

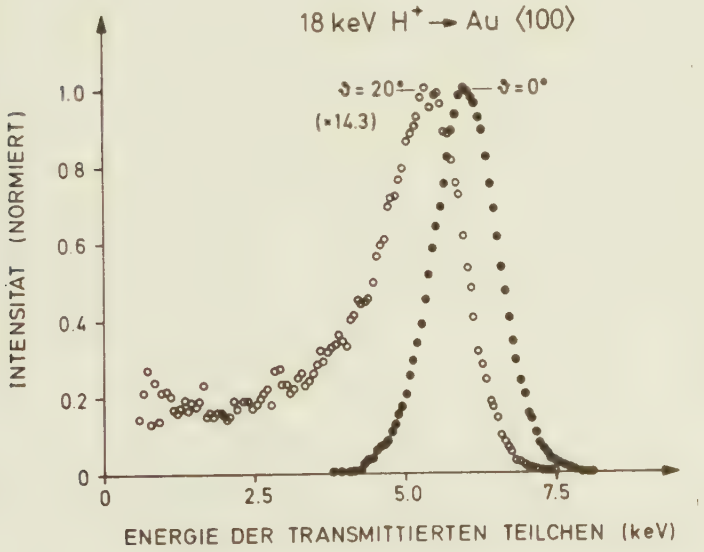


Abb. 14: Energieverteilungen der insgesamt aus dem Target unter $\vartheta = 0°$ und $\vartheta = 20°$ austretenden Teilchen für den Einschuß von 18 keV Protonen in die <100>-Richtung eines 1200 Å dicken Goldfilms. $\alpha = 0°$. Die Spektren sind auf die Intensitätsmaxima normiert.

Zum Vergleich zeigt Abb. 15 die Energieverteilungen der insgesamt aus dem Target austretenden Teilchen für mehrere Austrittswinkel für 17 keV Protonen, eingeschossen unter $\alpha = 0^{\circ}$ in eine 590 Å dicke polykristalline Goldfolie. Auch hier zeigt sich eine Verschiebung des Maximums zu kleineren Energien für steigende Austrittswinkel $\vartheta$ und das Anwachsen der Intensität im niederenergetischen Teil des Spektrums. Hier fällt die Intensität im Maximum von $\vartheta = 0^{\circ}$ bis $\vartheta = 38^{\circ}$ nur um den Faktor 9,3. Die Energiedifferenz der Maxima der Spektren bei diesen Winkeln beträgt etwa 890 eV.

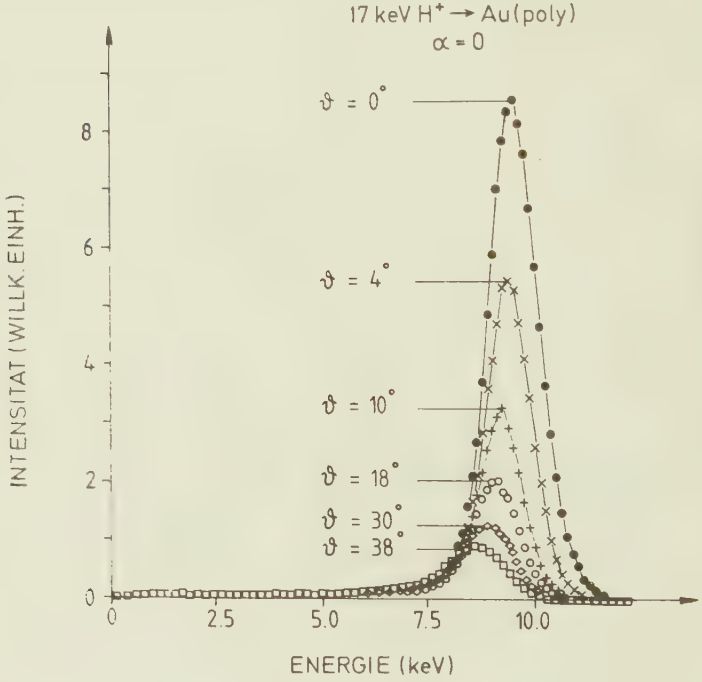


Abb. 15: Energieverteilungen der insgesamt aus einem polykristallinen Film der Dicke 590 Å unter $\vartheta = 0^{\circ}$, $4^{\circ}$, $10^{\circ}$, $18^{\circ}$, $30^{\circ}$ und $38^{\circ}$ austretenden Teilchen für den Einschuß von Protonen der Primärenergie 17 keV unter $\alpha = 0^{\circ}$.

### 3.3.2 Bestimmung des Energieverlustes

Unter der Annahme, daß die von der Theorie geforderte Geschwindigkeitsproportionalität des elektronischen Energieverlustes gültig ist, ergibt sich durch Integration von (19) die Proportionalitätskonstante k zu

$$k = \frac{2\,(\sqrt{E_o} - \sqrt{E_1})}{t} \tag{49}$$

Damit kann k aus den experimentell bestimmbaren Größen der Primärenergie $E_o$, der Dicke der durchquerten Schicht t und der Austrittsenergie $E_1$ berechnet werden. Die Bestimmung des differentiellen Energieverlustes ist nur für die Energieanalyse in Einschußrichtung infolge der guten Übereinstimmung der Bahnlänge der analysierten Teilchen mit der durchquerten Dicke sinnvoll. Der Energieverlust dE/dx ergibt sich dann über (49) und (19).
Wegen der nahezu gaußförmigen Energieverteilungen in diesem Fall ist die Energie, bei der das Maximum der Verteilung liegt, der wahrscheinlichste Wert für $E_1$. Eine Bestimmung des Energieverlustes über die Beziehung $dE/dx = \Delta E/t$ ist zu ungenau, da das nur für $\Delta E \ll E_o$ eine gute Näherung ist. Letzteres ist aber bei den Messungen nicht der Fall. Der Auftrag der über (49) bestimmten k-Werte in Abhängigkeit der zu den Paaren $(E_o, E_1)$ über

$$\bar{E} = \frac{\int_{E_1}^{E_o} K\,E^{1/2}\,E\,dE}{\int_{E_1}^{E_o} K\,E^{1/2}\,dE} = \frac{3}{5}\,\frac{E_o^{5/2} - E_1^{5/2}}{E_o^{3/2} - E_1^{3/2}} \tag{50}$$

berechneten mittleren Energie $\bar{E}$ (für die experimentelle Energieverlustbestimmung von Dearnaley et al., 1973, vorgeschlagen) muß im Falle einer v-Proportionalität des Energieverlustes zu einem innerhalb der Fehlergrenzen konstanten Wert für k führen.

Dieser Auftrag für die $H^+$, $D^+$ und $He^+$ Ionen in den Kristallrichtungen <100> und <110> und für ein polykristallines Target, bestimmt aus der Analyse in Einschußrichtung, d.h. $\alpha = 0^o$ bzw. $45^o$ und $\vartheta = 0^o$, zeigt Abb. 16. Hierbei wurden die k-Werte und die mittleren Energien auf die Masse des Protons normiert, damit ein direkter Vergleich von $k(\bar{E})$ für die verschiedenen Ionen bei gleicher Geschwindigkeit nach Gleichung (19) möglich ist. A ist die Kernmassenzahl der Ionen. Abbildung 16 zeigt folgende Ergebnisse:

1) Für die $H^+$ und $D^+$ Ionen ergibt sich innerhalb der Fehlergrenzen ein konstanter Wert für k nur im Energiebereich über 8 keV/Nukleon. Für $He^+$ liegen für diesen Bereich aus den in 3.1 angeführten Gründen keine Meßwerte vor.

2) Sowohl für $H^+$, $D^+$ und $He^+$ fallen die k-Werte unter 8 keV/Nukleon um so stärker, je kleiner die mittlere Energie pro Nukleon wird. Der Verlauf der $k(\bar{E})$-Werte ist für alle drei Kristallfälle innerhalb der Fehlergrenzen gleich.

3) Die $k(\bar{E})$-Werte für $H^+$ und $D^+$ sind innerhalb der Fehlergrenzen gleich. Die Übereinstimmung der Werte ist für die <100> Richtung noch besser als für das polykristalline Target. Der Vergleich wurde jeweils am gleichen Target durchgeführt und ist somit unabhängig vom Dickenfehler.

4) Deutliche Unterschiede ergeben sich in der Größe der $k(\bar{E})$-Werte zwischen den verschiedenen Kristallfällen. So ergibt sich für die Protonen die Relation $k_{(Poly)} > k_{<100>} > k_{<110>}$ und für die Heliumionen $k_{(Poly)} > k_{<100>}$. Der Unterschied zwischen den $k(\bar{E})$-Werten der Protonen für die Richtungen <100> und <110> ist am genauesten bestimmt, da er an der gleichen Folie gemessen wurde.

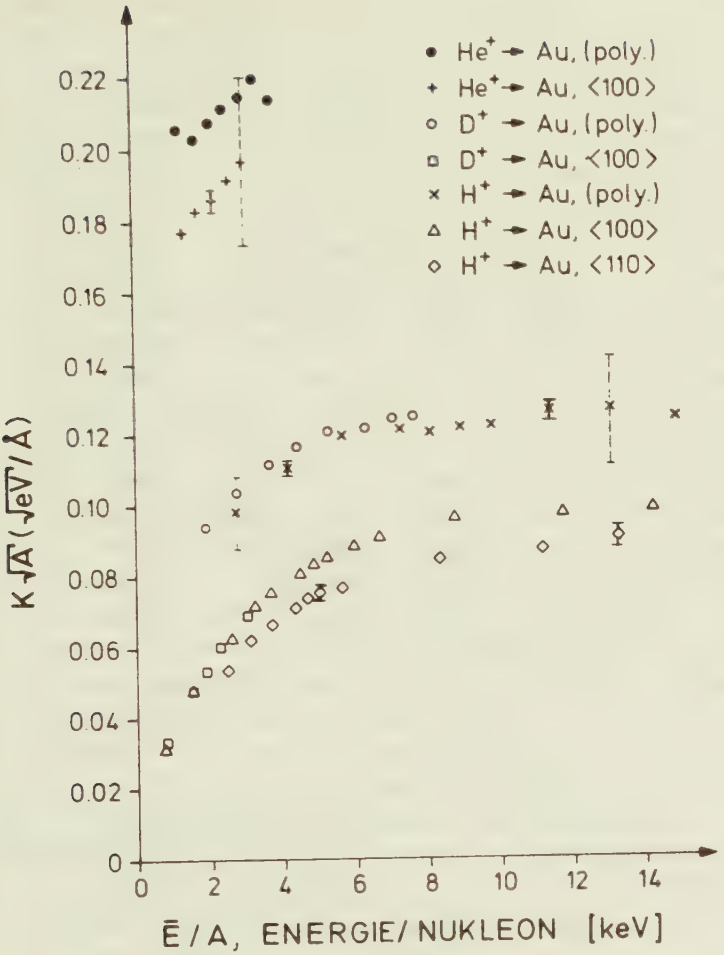


Abb. 16: Experimentell bestimmte Werte für die Proportionalitätskonstante k als Funktion der mittleren Energie $\bar{E}$ für $H^+$, $D^+$ und $He^+$-Ionen transmittiert durch einkristalline Goldfilme in den Richtungen <100> und <110> und durch polykristalline Goldfilme. $\alpha = 0^\circ$ bzw. $45^\circ$ und $\vartheta = 0^\circ$. Um einen Vergleich bei gleicher Geschindigkeit zu erhalten, wurden die k- und $\bar{E}$-Werte jeweils auf ein Nukleon normiert. A ist die Massenzahl der Kerne der Ionen.

Bei dem Vergleich der $k(\bar{E})$-Werte ist zu beachten, daß diese Werte zum Teil an einem Film und zum Teil an verschiedenen Filmen bestimmt wurden. Dies führt zu unterschiedlichen Fehlern der k-Werte. So ist beim Vergleich zwischen k-Werten, die an verschiedenen Filmen ermittelt wurden, neben dem Fehler in der Bestimmung von $E_1$, der nach 3.3.1 2 % beträgt, auch der Dickenfehler, der nach 3.2.3 etwa 10 % beträgt, also fünfmal so groß wie der Fehler von $E_1$ ist, anzusetzen. Der Fehler der Primärenergie kann wegen seiner Kleinheit (2 °/oo) völlig vernachlässigt werden. Der Gesamtfehler von somit etwa 12 % ist in Abb. 16 an einigen Beispielen als gestrichelter Balken eingezeichnet. Er ist für den Vergleich zwischen den an poly- und einkristallinen Targets gemessenen Werten für $H^+$, $D^+$ und $He^+$ und für die absolute Lage der $k(\bar{E})$ Kurven anzusetzen. Auf die funktionelle Abhängigkeit der $k(\bar{E})$-Werte hat er keinen Einfluß. Hier ist nur der Fehler von $E_1$ zu berücksichtigen, der in Abb. 16 an einigen Beispielen als Balken mit nicht unterbrochener Linie eingetragen ist. Die Abhängigkeit der k-Werte von der Energie bzw. Geschwindigkeit der Teilchen ist somit experimentell gesichert. Allerdings hat die Angabe eines k-Wertes im nicht v-proportionalen Bereich des Energieverlustes nur mehr einen approximativen Sinn für die Bestimmung des Energieverlustes an der Stelle $\bar{E}$.
Um ein Gefühl für die Schwankungen der k-Werte für verschiedene Filmdicken bei jeweils der gleichen Primärenergie zu erhalten, ist in Abb. 17 der Verlauf von k als Funktion der mittleren Energie für Protonen für vier Filme verschiedener Dicke aufgetragen. Es ergibt sich zwischen der dicksten Folie von 1200 Å und der dünnsten Folie von 560 Å ein Unterschied von etwa 23 %, was dem maximalen Dickenfehler gerade entsprechen würde. Dies und die Tatsache, daß etwa in der Mitte zwischen diesen extremen Werten die Werte liegen, die an einem dünnen und einem dicken Film gemessen wurden, läßt vermuten, daß die Filme der Dicken 620 Å und 1100 Å einen wesentlich kleineren Dicken-

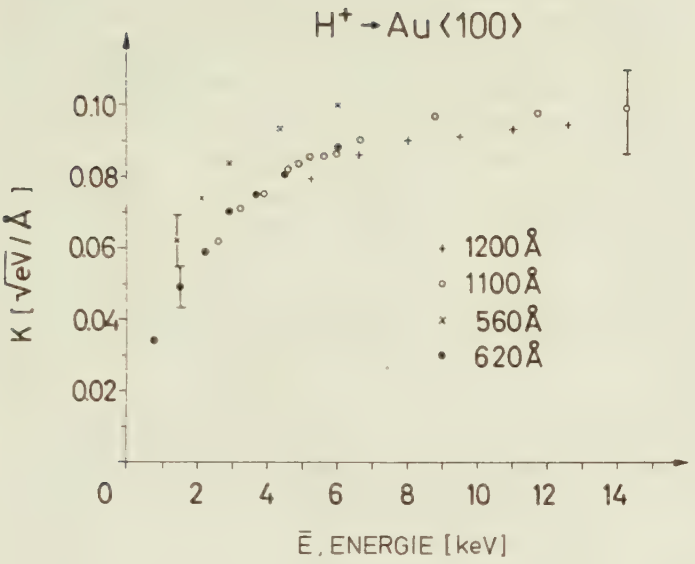


Abb. 17: Verlauf der Experimentell ermittelten k-Werte für Protonen als Funktion der mittleren Energie $\bar{E}$ für vier verschieden dicke einkristalline Goldfilme. Die Transmission erfolgte in der <100>-Richtung. $\alpha = 0^\circ$ und $\vartheta = 0^\circ$.

fehler aufweisen. An letzter Folie wurden die $k_{<100>}$- und $k_{<110>}$-Werte für Protonen bestimmt. Die Tatsache, daß die höchsten k-Werte der dünnsten Folie und die kleinsten k-Werte der dicksten Folie entsprechen, ist wegen der kleinen Zahl der Filme statistisch nicht signifikant.

Eine andere Möglichkeit, die Proportionalität des Energieverlustes zur Geschwindigkeit zu überprüfen, ergibt sich direkt aus der Beziehung (49). Ist diese Formel gültig, so muß der Auftrag $E_1^{1/2}$ gegen $E_o^{1/2}$ eine Gerade mit der Steigung 1 geben (Overbury et al., 1979). Abbildung 18 zeigt das Ergebnis dieses Auftrages für die Transmission von $H^+$, $D^+$ und $He^+$ durch ein polykristallines Target der Dicke

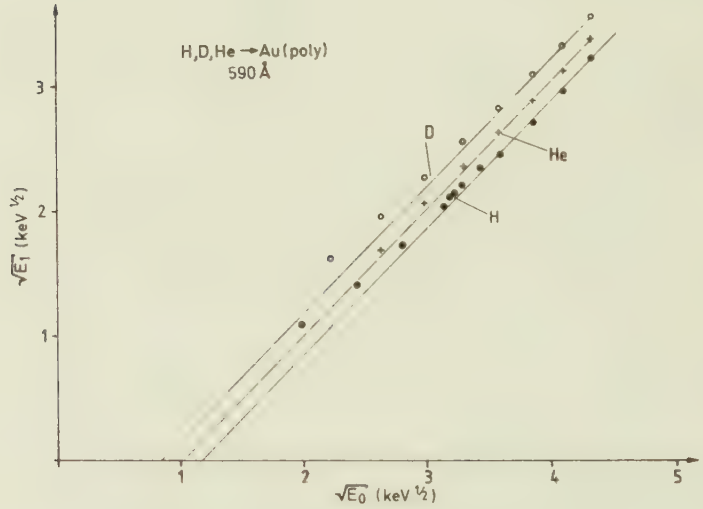


Abb. 18: Auftrag von $(E_1)^{1/2}$ ($E_1$ Maximum der Energieverteilung) gegen $(E_o)^{1/2}$ für $H^+$, $D^+$ und $He^+$-Ionen nach der Transmission durch einen 590 Å dicken polykristallinen Goldfilm. $\alpha = 0^\circ$ und $\vartheta = 0^\circ$.

590 Å für $\alpha = 0^\circ$ und $\vartheta = 0^\circ$, da sich hier infolge des günstigen Zusammentreffens von Dicke und Primärenergien eine schöne Trennung der Kurven für die jeweiligen Ionen ergibt. Die Linien in Abb. 18 mit der Steigung 1 wurden an die Energiepunkte über $E_o^{1/2}$ angepaßt. Für $H^+$ und $D^+$ ergibt sich für fallende Primärenergien eine Abweichung von den Linien, die die v-Proportionalität darstellen, in Richtung höherer $E_1$-Werte. Hingegen liegen die Werte für $He^+$ etwa auf der Linie der v-Proportionalität. Dieser Unterschied zu Abb. 16 ist eine Folge der Energiedarstellung in Abb. 18, die Wasserstoff und Helium nicht bei gleicher Geschwindigkeit vergleicht. Aus dem Schnittpunkt der Linien mit der $E_o^{1/2}$-Achse in Abb. 18 kann man über Gleichung (49) die k-Werte im v-proportionalen Bereich berechnen.

In Tab. 5 sind die k-Werte für den v-proportionalen Bereich des Energieverlustes für $H^+$, $D^+$ und $He^+$ in den untersuchten Kristallfällen eingetragen. Sie wurden aus dem Schnittpunkt der zur $\bar{E}/A$-Achse parallelen Asymptoten zu den $k(\bar{E})$-Kurven mit der $K\,A^{1/2}$-Achse in Abb. 16 und Division durch $\sqrt{A}$ gewonnen. Die k-Werte für $D^+$ und $He^+$ wurden unter der Annahme, daß die fehlenden Meßpunkte etwa den gleichen Krümmungsverlauf wie die Protonenkurven haben würden, bestimmt. Falls diese Annahme richtig ist, führt dieses Verfahren zu einem zusätzlichen Fehler von etwa 4 % für die $k_{He}$-Werte und etwa 1 % für die $K_D$-Werte in Tab. 5.

| Target | k $\left[\sqrt{eV/Å}\right]$ | | |
|---|---|---|---|
| | $H^+$ | $D^+$ | $He^+$ |
| $Au_{(Poly)}$ | 0.128 ± 0.015 | 0.091 ± 0.011 | 0.117 ± 0.018 |
| $Au_{<100>}$ | 0.100 ± 0.012 | 0.070 ± 0.008 | 0.110 ± 0.017 |
| $Au_{<110>}$ | 0.093 ± 0.011 | - | - |

Tab. 5: Experimentell bestimmte k-Werte für $H^+$, $D^+$ und $He^+$ in poly- und einkristallinem Gold für den v-proportionalen Bereich des Energieverlustes.

Die Berechnung des k-Wertes aus den Energieverteilungen, die unter $\vartheta \neq 0^{\circ}$ aufgenommen wurden, ist problematisch. Hier weiß man nicht, welche Bahnlänge den Teilchen im Maximum des Spektrums zugeordnet werden muß. Eine ziemlich willkürliche Annahme für die Bahnlänge dieser Teilchen ist der Mittelwert $\bar{t}$ von t und t/cos$\vartheta$ , d.h.

$$\bar{t} = \frac{t(1 + 1/\cos\vartheta)}{2} \qquad (51)$$

Die Bahnlänge t wird einer Ablenkung des Ions um den Winkel $\vartheta$ an der Austrittsfläche des Targets und t/cos$\vartheta$ einer Ablenkung um $\vartheta$ an der Eintrittsfläche zugeordnet. Dabei wird angenommen, daß die Summe der Ablenkungen vor bzw. nach dem Großwinkelstoß klein gegen dessen Ablenkung ist, sodaß t und t/cos$\vartheta$ die Extremwerte für die Bahnlänge des Ions zum Austrittswinkel $\vartheta$ sind. Abbildung 19 zeigt für 13 keV $H^+$ und $He^+$ Ionen, die unter $\alpha = 0^{\circ}$ in ein polykristallines Target der Dicke 590 Å eingeschossen wurden, den über Formel (49) und Beziehung (51) bestimmten k-Wert in Abhängigkeit des Austrittswinkels $\vartheta$ . Aus Abb. 19 entnimmt man für $H^+$ einen Anstieg von 3 % und für $He^+$ einen Anstieg von 10 % bis $\vartheta = 25^{\circ}$ bezüglich des k-Wertes bei $\vartheta = 0^{\circ}$. Die Näherung (51) ist bezüglich der Extremwerte t und t/cos$\vartheta$ mit einem maximalen Fehler von 5 % für $\vartheta = 25^{\circ}$ behaftet. Dies führt zusammen mit dem 2 %igen Fehler von $E_1$ zu einem maximalen Fehler von 7 % für die k-Werte bei $\vartheta = 25^{\circ}$. Dies bedeutet, daß innerhalb der besprochenen Annahmen nur der Anstieg der k-Werte von Helium in Abb. 19 signifikant ist. Da die Näherung (51) für die Berechnung der k-Werte aus den entsprechenden Spektren von den einkristallinen Targets noch zweifelhafter als für polykristalline Targets ist, erfolgt hier für erstere keine Darstellung.

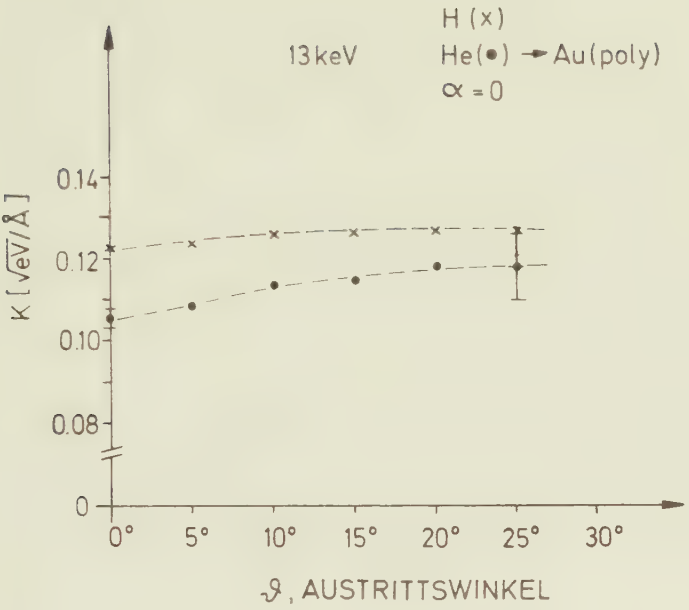


Abb. 19: Experimentell bestimmte k-Werte für 13 keV $H^+$- und $He^+$-Ionen nach der Transmission durch eine 590 Å dicke polykristalline Goldfolie in Abhängigkeit des Austrittswinkels $\vartheta$. $\alpha = 0^\circ$.

Um zu prüfen, ob die polykristallinen Filme eine kristalline Vorzugsrichtung in der Einschußrichtung aufweisen, wurden für einen Film der Dicke 590 Å für 13 keV $H^+$ und $He^+$ Energieanalysen unter $\vartheta = 0^\circ$ in Abhängigkeit des Eintrittswinkels $\alpha$ durchgeführt. Das Ergebnis zeigt Abb. 20. k ist unabhängig von $\alpha$ im Bereich $0^\circ \leq \alpha \leq 40^\circ$. Für die Bestimmung der k-Werte wurde für die Bahnlänge der analysierten Teilchen $t' = t/\cos\alpha$ , d.h. die Dicke der durchquerten Targetschicht, angenommen. Die Fehlerbalken in Abb. 20 entsprechen der Unsicherheit von 2 % für den $E_1$-Wert.

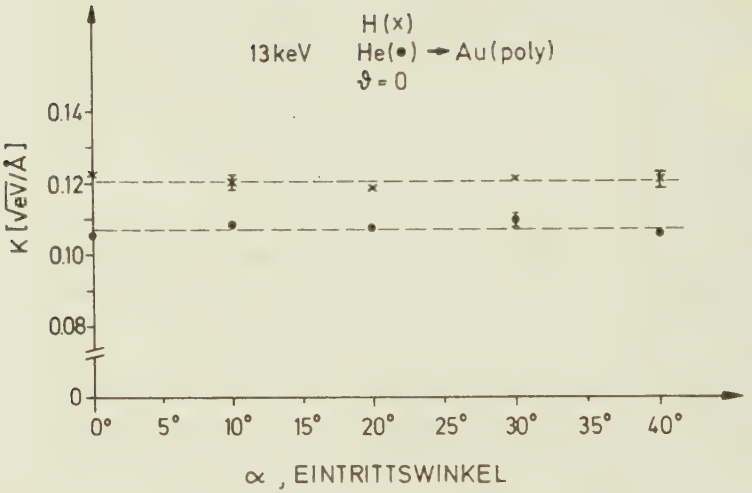


Abb. 20: Abhängigkeit des experimentellen k-Wertes vom Eintrittswinkel α für die Transmission von 13 keV $H^+$- und $He^+$-Ionen durch eine 590 Å dicke polykristalline Goldfolie. $\vartheta = 0^\circ$.

Der differentielle Energieverlust dE/dx für $H^+$, $D^+$ und $He^+$ in Au <100>, Au <110> und für ein polykristallines Goldtarget ergibt sich über die Formel (19) mit den $k(\bar{E})$-Werten aus Abb. 16. Diese Berechnung ist jedoch nur eine Näherung für den Energieverlust, da sich ja k als energieabhängig erweist. Nimmt man probeweise für die niedrigen Energien eine Proportionalität des Energieverlustes zur Energie an, so ergibt sich für die Proportionalitätskonstante $k_E = (\ln E_o/E_1)/t$ ein von E unabhängiger Wert.

Daraus berechnet sich für diese Energien eine Abweichung von +24 % bezüglich des dE/dx-Wertes, der über obige Näherung erhalten wird. In der Diskussion in Abschnitt 4.2.2 wird sich jedoch erweisen, daß die Abhängigkeit der k-Werte von der Energie eine Folge der Elektronendichteabhängigkeit von k ist.
Abbildung 21 zeigt den über die $k(\bar{E})$-Werte bestimmten differentiellen Energieverlust von $H^+$ und $He^+$ für die untersuchten Kristallrichtungen als Funktion der Energie pro Nukleon E/A. Als Vergleich hierzu sind die einzigen sonst noch existierenden Messungen für diesen Energiebereich von Högberg et al. (1970) eingetragen. Ihre dE/dx-Werte für die <111> und <112> Richtungen in Gold sind nicht eingetragen. Für die <110> Richtung in Gold erhalten sie etwa um 10 % kleinere Werte für dE/dx. Diese Abweichung beruht vermutlich auf der Dickenmessung.
In Abb. 22 sind die Ergebnisse der dE/dx-Bestimmung für $H^+$ in polykristallinem Gold als Funktion der Energie dargestellt. Die Ergebnisse von Bätzner (1936), Gott et al. (1962), Morita et al. (1967), Morton (1967) und Nomura et al. (1975) sind zum Vergleich in Abb. 22 eingetragen. Es besteht eine außerordentlich große Streuung zwischen den Ergebnissen der verschiedenen Autoren, die bis zu einem Faktor 3 auseinander liegen. Dieser große Unterschied kann nur durch den Fehler der Dickenmessung der Targets verursacht werden, insoweit Transmissionsmessungen zur Energieverlustbestimmung durchgeführt worden sind. So können Dickemessungen, die nicht direkt an dem Film, an dem der Energieverlust bestimmt wurde, infolge von Inhomogenitäten der Filme zu beträchtlichen Fehlern führen. Die niedrigsten Werte von Morton et al. kommen vermutlich durch die starken Abweichungen der realen Bahnlängen der Ionen von den in die Berechnungen eingesetzten Bahnlängen zustande. Diese Ergebnisse wurden nicht über den Durchschuß durch dünne Filme, sondern durch Messung der Elektronen-Löcher-Paare als Funktion der Energie für einen Oberflächen-

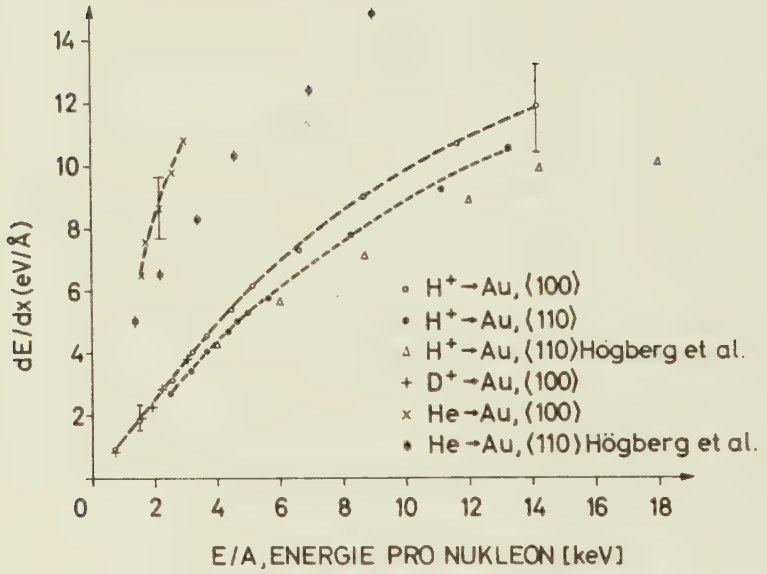


Abb. 21: Experimentell bestimmter differentieller Energieverlust dE/dx als Funktion der Energie/Nukleon für $H^+$ in Au<100> und <110>, $D^+$ in Au<100> und $He^+$ in Au<100>. Zum Vergleich sind die Messungen von Högberg et al. (1970) für $H^+$ und $He^+$ in Au<110> eingetragen. Die Linien durch die Meßpunkte dieser Arbeit dienen zur Führung des Auges.

sperrschichtzähler mit einer dünnen Goldauflage gewonnen. Bei dieser Methode tragen auch die Teilchen bei, die stärker abgelenkt wurden und damit wesentlich größere Weglängen durchlaufen haben. Für den Energiebereich unter 10 keV gibt

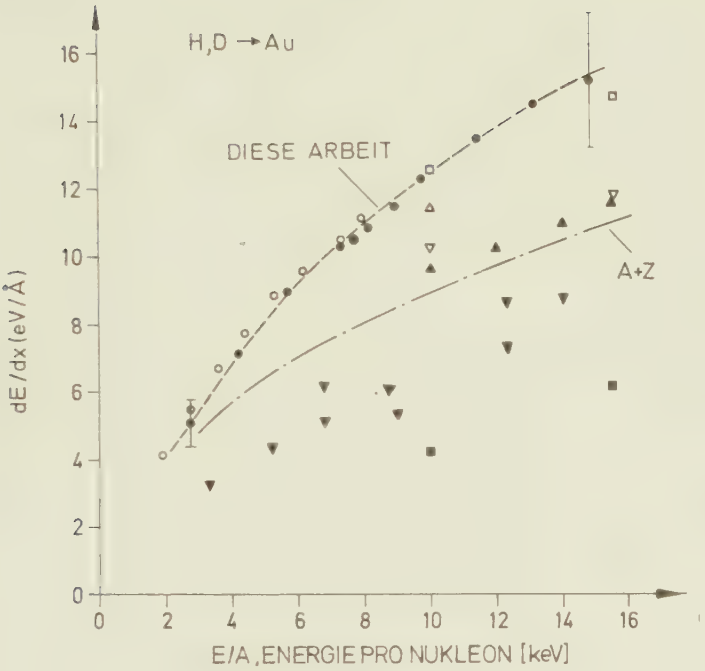


Abb. 22: Experimentell bestimmter differentieller Energieverlust dE/dx für $H^+$- (•) und $D^+$-(○) Ionen in polykristallinem Gold als Funktion der Energie/Nukleon im Vergleich mit anderen Messungen unter 20 keV:

▽ Bätzner (1936); ▲ Gott et al. (1962); □ Morita et al. (1967); ■ Morton (1967); △ Cano (1974); ▼ Nomura et al. (1975); -.- semiempirische Kurve von Andersen and Ziegler (1977).

es nur die Messungen von Numura et al., die keine Abweichung von der v-Proportionalität ergeben. Dies steht im Widerspruch zu den Messungen dieser Arbeit und den Messungen von Högberg für die einkristallinen Richtungen. Große Inhomogenitäten der Filme könnten zu einer Ausmittelung der Abweichung führen. Außerdem zeigt der Auftrag $dE/dx = \Delta E/t$, wie in Nomura et al., benutzen eine Abweichung nur sehr schwach, wie der dE/dx-Verlauf der eigenen Werte in Abb. 21 und 22, im Gegensatz zum k(E)- bzw. $E_1^{1/2}$-Verlauf deutlich macht. Die Punkt-Strich-Kurve gibt den Verlauf der semiempirischen Energieverlustwerte von Andersen und Ziegler (1977) wieder.

Abbildung 23 zeigt die Ergebnisse für den Polykristall für $He^+$. Auch hier ist die Kurve von Ziegler (1977) für den Energieverlust von $He^+$ eingetragen, jedoch beruht hier die Kurve auf der Extrapolation der bei höheren Energien gemessenen Werte und den theoretischen Werten. Die einzigen anderen existierenden Messungen von Nomura et al. (1975) sind ebenfalls eingezeichnet. Auffallend ist die große Streuung dieser Werte. Sie liegen wie die H-Werte etwa 50 % unter den Werten dieser Arbeit. Auch hier ist der Unterschied auf den Dickenfehler zurückzuführen. Neuere Messungen von Thompson und Poehlman (1980) zeigen für Protonen für $E_o > 20$ keV um 10 % höhere Werte als Andersen und Ziegler. Für Helium messen sie in diesem Bereich etwa um 20 % höhere Werte, liegen also etwa in der Mitte zwischen Ziegler und den Messungen dieser Arbeit.
Die Fehlerbalken, die in den Abb. 21, 22 und 23 an einigen Beispielen eingezeichnet sind, entsprechen dem Fehler der k-Werte von $\pm$ 12 %.

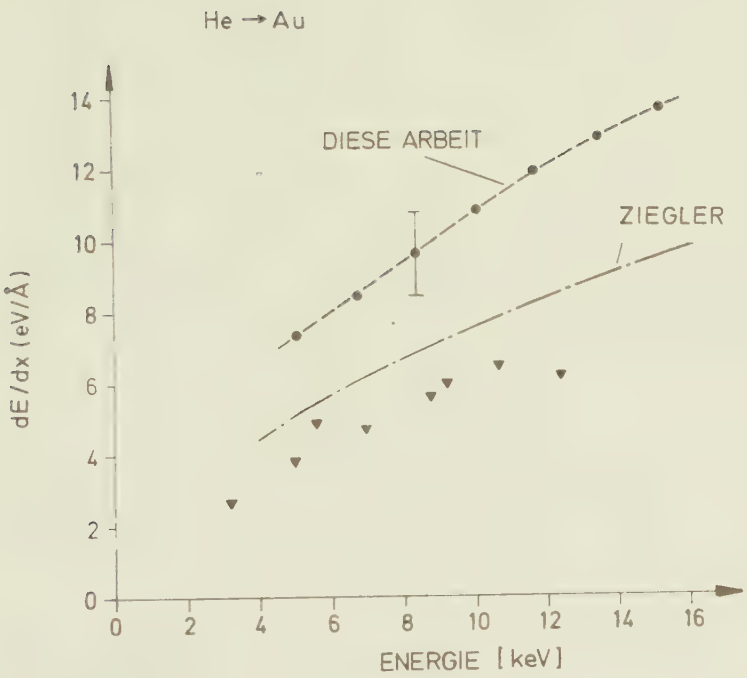


Abb. 23: Experimentell bestimmter differentieller Energieverlust dE/dx für $He^+$ in polykristallinem Gold als Funktion der Energie im Vergleich mit den Messungen von Nomura et al. (1975) (▼) und der semiempirischen Kurve (•–•) von Ziegler (1977). Die gestrichelte Linie durch die Meßpunkte dieser Arbeit dient zur Führung des Auges.

### 3.3.3 Halbwertsbreiten der Energieverteilungen

Lindhard (1954) berechnet für die Energieverbreiterung der Ionen in einem Fermigas auf Grund des statistischen Charakters des Energieverlustprozesses die Beziehung (39). Um dieses Gesetz zu überprüfen, sind in Abb. 24 das relative Straggling $\Omega^2/\Delta E$ für ein polykristallines Target, Au<110> und Au<100> für die Analyse in Einschußrichtung als Funktion von $\bar{E}^{1/2}$ aufgetragen. Die Standardabweichung der Energieverteilungen wurde über die Beziehung $\Omega = 0{,}18\ \omega$ bestimmt, wobei $\omega$ die aus den Spektren bestimmte Halbwertsbreite (HWHM) ist. Die beobachtete Energieverteilung I(E) ergibt sich aus der Faltung der wahren Energieverteilung I'(E) mit der Spektrometerfunktion S(E,E')

$$(52) \qquad J(E) = \int S(E,E')\, J'(E')\, dE'$$

Unter der Annahme, daß S ebenfalls eine Gaußfunktion ist, gilt:

$$(53) \qquad \omega^2 = \omega_S^2 + \omega_J^2$$

Für die vorliegenden Messungen ist $\omega_s$ von der Größe 1 % von $\omega$, also $\omega_s << \omega$. Deshalb ist der Einfluß der Spektrometerauflösung in guter Näherung vernachlässigbar. Als Vergleich zu den experimentellen Werten ist in Abb. 24 die Lindhardbeziehung (39) eingezeichnet. Dabei wurde der theoretische Wert für die Plasmonenenergie in Gold $\hbar\omega_o = 25{,}8$ eV (Jsaacson, 1975), der einem Wigner-Seitz-Radius von $r_s = 1{,}49$ [a.E.] entspricht, verwendet. Die Proportionalitätskonstante in (39) wurde als 1 angenommen. Abbildung 24 zeigt, daß das experimentelle relative Straggling von der v-Proportionalität abweicht. Da das relative Straggling unabhängig von der Dicke des Targets ist, der Fehler des relativen Stragglings nur durch den Fehler von $\Delta E$, der etwa

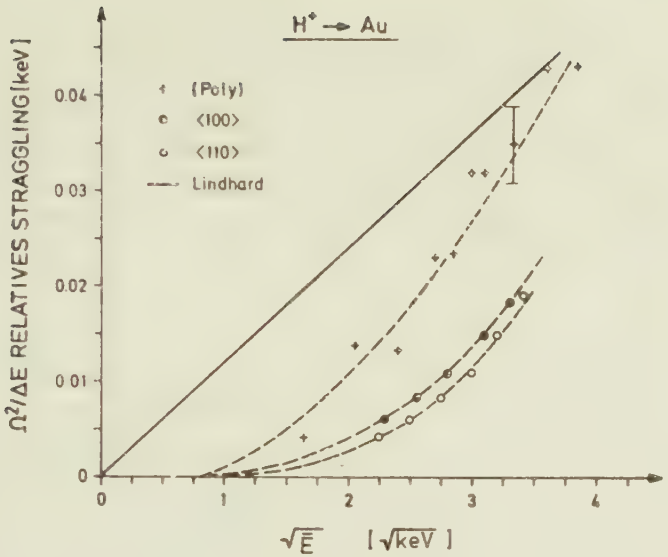


Abb. 24: Relatives Straggling in Abhängigkeit von $(\bar{E})^{1/2}$ für Protonen in (Poly), <100> und <110> im Vergleich mit den theoretischen Werten nach Lindhard (1954). Die gestrichelten Lienen dienen zur Führung des Auges.

2 % beträgt, und der Ungenauigkeit in der Bestimmung von $\omega$, die etwa 10 % beträgt, bedingt. Die geringe Streuung der Meßpunkte für die Richtungen <100> und <110> deutet auf einen kleineren Fehler für die Halbwertsbreitenbestimmung für diese Werte hin, so daß der Unterschied zwischen diesen Werten signifikant ist. Für Helium wurde wegen der wesentlich größeren Fehler bei der Bestimmung der Halbwertsbreiten, verursacht durch die größeren Abweichungen der Spektren von der Gaußverteilung, eine Bestimmung des relativen Stragglings nicht durchgeführt.

Die für den Polykristall auftretenden größeren Schwankungen zwischen den Meßpunkten sind vermutlich auf die schlechtere Qualität dieser Filme gegenüber den einkristallinen Filmen zurückzuführen. Letztere sind wesentlich homogener infolge der Silberzwischenschicht beim Aufdampfen, wie bereits in 3.2.1 erörtert wurde. Bemerkenswert ist die niedrige Lage der Meßpunkte bezüglich der Lindhardgeraden für $\bar{E}^{1/2} < 3\ keV^{1/2}$.

### 3.3.4 Winkelverteilungen

Für die Auswertung und Interpretation der Energieverlustmessungen ist es notwendig, Informationen über die Streuung der Ionen im Target, d.h. über die Bahnen der Ionen zu erhalten. Hierzu wurde für einige Primärenergien von Protonen Intensitätsverteilungen der positiv und neutral austretenden Teilchen in Abhängigkeit des Austrittswinkels $\vartheta$ für $\alpha = 0^\circ$ bzw. des Eintrittswinkels $\alpha$ für $\vartheta = 0^\circ$ gemessen. Als Intensitätswert wurde aus den entsprechenden Energieverteilungen $I_i(E_i)$ die Summe $\sum_i I_i(E_i)$ angesetzt.

Abbildung 25 zeigt die Verteilung der positiven Teilchen $N^+$ und der insgesamt aus dem Target austretenden Teilchen $N^T$ in Abhängigkeit des Austrittswinkels $\vartheta$ für 18 keV Protonen, eingeschossen in die <100>-Richtung eines 1200 Å dicken Goldfilms. Die Gleichheit der Verteilungen der positiven und der gesamten Teilchen wird hier zum ersten Mal demonstriert. Dies war auch schon aus der Gleichheit der Energiespektren von geladenen und neutralen Teilchen bei der Analyse in Einschußrichtung zu erwarten. Aus Abb. 25 entnimmt man eine Halbwertsbreite von $\vartheta_{1/2} = 3{,}5^\circ$.

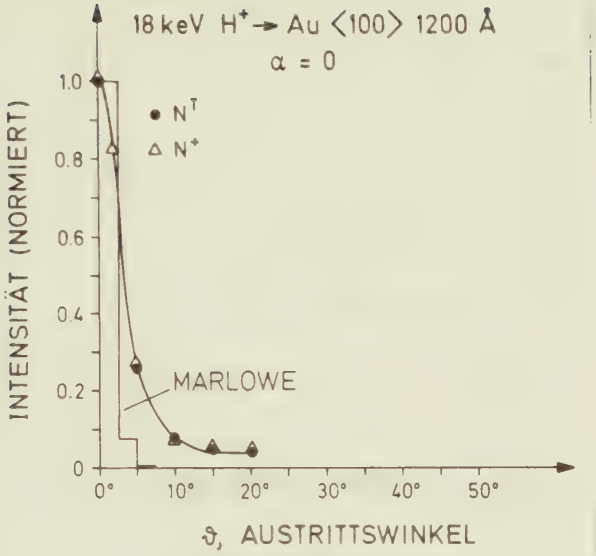


Abb. 25: Intensitätsverteilung der gesamten (Neutrale + Positive + Negative) austretenden Teilchen $N^T$ und der positiv austretenden Teilchen $N^+$ als Funktion des Austrittswinkels $\vartheta$ für den Einschuß von Protonen der Primärenergie 18 keV in die <100>-Richtung, d.h. $\alpha = 0^\circ$, eines 1200 Å dicken einkristallinen Goldfilms. Zum Vergleich ist die entsprechende Verteilung nach der Computersimulation (Marlowe) eingetragen.

Abbildung 26 zeigt das Ergebnis der analogen Messung für 6 keV Protonen auf eine 560 Å dicke Goldfolie in <100>-Richtung. Hier sind jedoch statt der Summe aus geladenen und neutralen Teilchen nur die Neutralen aufgetragen. Auch hier zeigt sich eine Übereinstimmung der Winkelverteilung der positiv und neutral austretenden Teilchen. Die Halbwertsbreite beträgt hier $\vartheta_{1/2} = 4^\circ$. Der Einfluß der

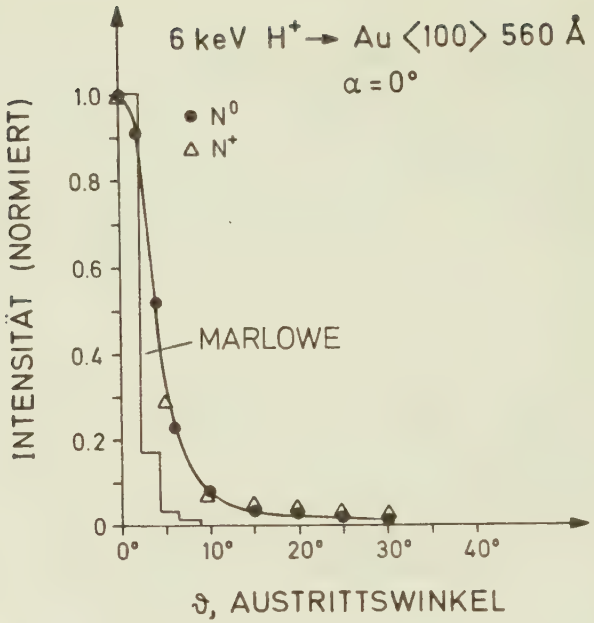


Abb. 26: Intensitätsverteilung der neutral austretenden Teilchen $N^0$ und der positiv austretenden Teilchen $N^+$ als Funktion des Austrittswinkels $\vartheta$ für den Einschuß von Protonen der Primärenergie 6 keV in die <100>-Richtung, d.h. $\alpha = 0^\circ$, eines 560 Å dicken einkristallinen Goldfilms. Zum Vergleich ist die entsprechende Verteilung nach der Computersimulation (Marlowe) eingetragen.

wesentlich kleineren Primärenergie auf die Halbwertsbreite im Vergleich zu Abb. 25 wird offensichtlich durch die um den Faktor 2,12 kleinere Dicke in Abb. 26 nahezu kompensiert.

Die Austrittswinkelverteilung der insgesamt aus dem Target austretenden Teilchen von 17 keV Protonen nach der Durchquerung eines 590 Å dicken polykristallinen Goldfilms für den Einschuß unter $\alpha = 0^\circ$ zeigt Abb. 27. Hier ergibt sich

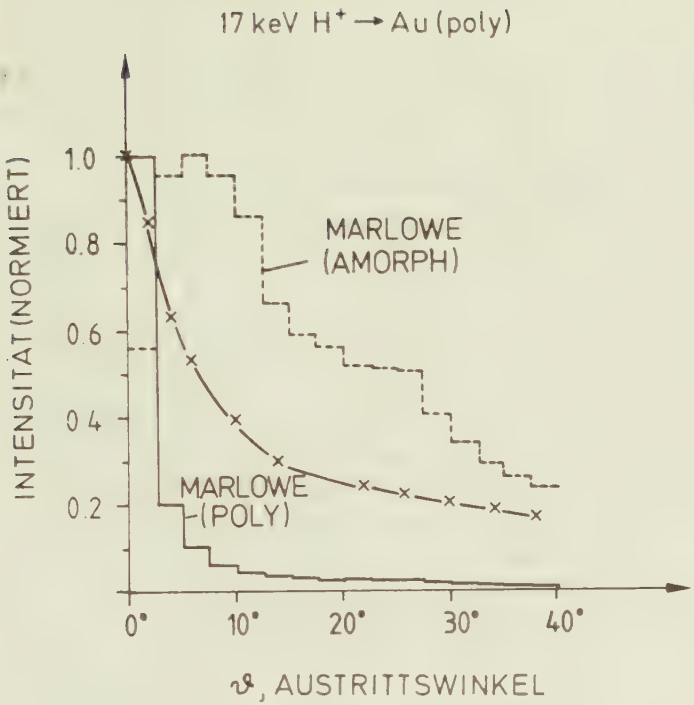


Abb. 27: Intensitätsverteilung der gesamten (Neutrale + Positive + Negative) austretenden Teilchen als Funktion des Austrittswinkels $\vartheta$ für den Einschuß von Protonen der Primärenergie 17 keV unter $\alpha = 0^{\circ}$ in einen 590 Å dicken polykristallinen Goldfilm. Zum Vergleich sind die entsprechenden Verteilungen für (Poly) und (Amorph) nach der Computersimulation (Marlowe) eingetragen.

eine Halbwertsbreite von $\vartheta_{1/2} = 6{,}5^{\circ}$. Der Vergleich mit der Halbwertsbreite aus Abb. 25 zeigt deutlich den Einfluß des Gitterführungseffektes auf die Breite der Winkelverteilung, wenn man bedenkt, daß die 18 keV Ionen über die

doppelte Dicke im Vergleich zu den 17 keV Protonen durchlaufen mußten.
In den Abb. 25, 26 und 27 sind die für die entsprechenden Primärenergien, Targetdicken und Kristallrichtungen über das Computersimulationsprogramm Marlowe (Robinson et al., 1974) erhaltenen Winkelverteilungen eingezeichnet. Eine kurze Beschreibung dieses Programms erfolgt in Abschn. 4.1 In Abb. 27 ist das Simulationsergebnis einer amorphen und einer "polykristallinen" Targetanordnung eingezeichnet.

Den Einfluß des Eintrittswinkels $\alpha$ auf die Intensitätsverteilung der aus einem einkristallinen Target der Dicke 1200 Å austretenden Teilchen bei den Detektorstellungen $\vartheta = 0^{\circ}$ und $\vartheta = \alpha$ zeigt Abb. 28 am Beispiel von Protonen der Primärenergie 18 keV. Das Target war hier so ausgerichtet wie in Abschnitt 3.1.2 beschrieben. Das heißt, $\alpha = 0^{\circ}$ entspricht dem Einschuß in die <100>-Richtung und $\alpha = 45^{\circ}$ dem Einschuß in die <110>-Richtung. In Abb. 28 ist die Intensitätsverteilung der neutral austretenden Teilchen $N^{0}$ dargestellt. Wird der Detektor entsprechend der Targetdrehung mitgeführt, d.h. $\vartheta = \alpha$, so bedeutet dies eine Messung der aus den <100> Kanälen austretenden Teilchen als Funktion des Einschußwinkels bezüglich der <100>-Kanäle. Bleibt der Detektor bei der Drehung des Targets um $\alpha$ in der Stellung $\vartheta = 0^{\circ}$, so erfolgt zunächst ein starker Rückgang der Intensität entsprechend dem Verschwinden der <100>-Gitterführung. Beim Erreichen der nächsten offenen Kristallrichtung, in Abb. 28 die Richtung <510>, ergibt sich wieder ein Anstieg der Intensität. Man sieht in Abb. 28, daß die Transmission in den Kanälen <510> um den Faktor 3,3 niedriger ist. Aus Abb. 28 ergibt sich für die Verteilung bei $\vartheta = 0^{\circ}$ eine Halbwertsbreite von $\alpha'_{1/2} = 2{,}8^{\circ}$ und für $\vartheta = \alpha$ eine Breite von $\alpha'_{1/2} = 3{,}5^{\circ}$. Letztere ist für die Winkelverteilung des <100>-Kanals charakteristischer, da hier echt der Eingang des Kanals ausgetastet wird. Hingegen erfolgt bei der Detektorstellung $\vartheta = 0^{\circ}$ eine zusätzliche Reduzierung der Intensität durch das Wegwandern der <100> Richtung von der Analysierrichtung.

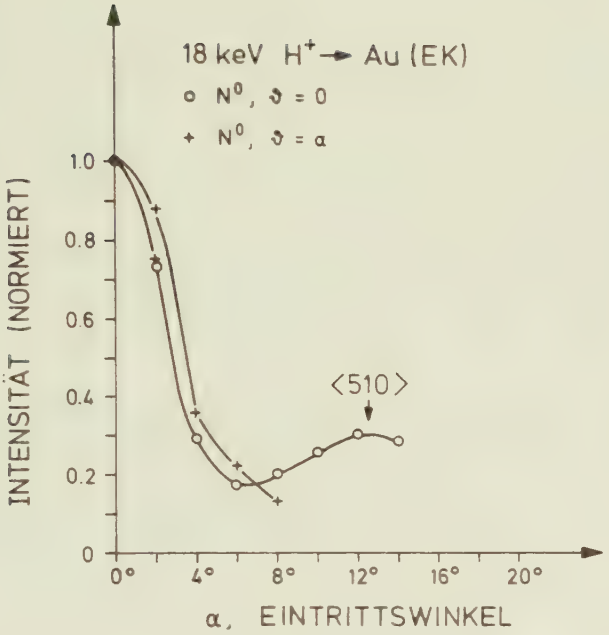


Abb. 28: Intensitätsverteilung der gesamten aus dem Target austretenden Teilchen in der (001) Ebene als Funktion des Eintrittswinkels α für den Einschuß von Protonen der Primärenergie 18 keV in einen 1200 Å dicken einkristallinen Goldfilm. (o) zeigt die Verteilung für die Detektorstellung $\vartheta = 0^{\circ}$ und (+) die Verteilung für $\vartheta = \alpha$.

# 4. Diskussion

## 4.1 Einfluß der nuklearen Wechselwirkung auf die Bestimmung des elektronischen Energieverlustes

Wie im Abschnitt 2.1 bereits dargelegt, führt die nukleare Wechselwirkung sowohl zu einem Energieverlust, als auch zu einer Ablenkung des Projektils. Beide Effekte sind im experimentell bestimmten Energieverlust enthalten. Ersterer ist direkt enthalten, während letzterer über die Bahn des Ions indirekt in den gemessenen Energieverlust eingeht.
Vergleicht man die nuklearen Standardenergieverlustwerte für Wasserstoff und Helium aus Tab. 6 mit den experimentell bestimmten Energieverlustwerten aus Abb. 22 und 23 für den Polykristall, so ergeben sich für den nuklearen Energieverlust folgende Werte in % bezüglich des experimentellen Energieverlustes:

| | E(keV) | H | He |
|---|---|---|---|
| Au (Poly) | 15 | 1 % | 8 % |
| | 2 | 3 % | - |

Tab. 6: Nuklearer Standardenergieverlust in %, bezogen auf den gemessenen Energieverlust für H und He in einem polykristallinen Target für eine hohe und eine niedrige Energie.

Berücksichtigt man, daß erstens die Standardenergieverlustwerte aus einer Mittelung über alle Stoßparameter folgen und zweitens der aus der Analyse experimentell bestimmte Energieverlust wegen des sehr kleinen Öffnungswinkels des Detektors für Teilchen bestimmt wurde, die große Stoßparameter bezüglich der Targetatomkerne durchlaufen haben, so ist klar, daß der nukleare Energieverlust bei der Bestimmung

des elektronischen Energieverlustes vernachlässigbar ist. Dies gilt in noch stärkerem Maße für den nuklearen Energieverlust der gittergeführten Ionen wegen der in Abschnitt 2.3 angeführten Gründe. Eine experimentelle Bestätigung dieses Sachverhaltes ist die sehr gute Übereinstimmung der experimentellen Energieverlustwerte für Protonen und Deuteronen bei gleicher Geschwindigkeit, sowohl für die Gitterführung ( < 1 %, Abb. 21), als auch für die Polykristalle ( < 7 %, Abb. 22). Denn der nukleare Energieverlust ist nach Formel (13) näherungsweise zur Masse des Projektils $M_1$ proportional. Hingegen ist der elektronische Energieverlust nach Formel (28) von $M_1$ unabhängig.

Der Einfluß der Ionenbahn geht auf zweierlei Weise in die Bestimmung des elektronischen Energieverlustes ein:

1) Die Bahnlänge bestimmt direkt den Wert des experimentell ermittelten Energieverlustes (Gleichung (49)).

2) Durch die Abhängigkeit des elektronischen Energieverlustes von der Elektronendichte hängt dieser bei einer inhomogenen Valenzelektronendichte von der Bahn des Ions ab.

Der exakte Bahnverlauf der analysierten Teilchen kann weder aus den Experimenten, noch aus der Theorie gewonnen werden. Jedoch lassen sich aus qualitativen Überlegungen, beruhend auf der Dynamik des Zweier-Stoßes in einem abgeschirmten Wechselwirkungspotential sowie aus den experimentellen Winkelverteilungen und aus der Simulation der Ionentransmission durch dünne Filme durch das Programm "Marlowe", Abschätzungen über die Bahnen gewinnen.
Ein grundsätzlicher Unterschied besteht zwischen den Bahnen geführter Teilchen und nicht geführter Teilchen. Bei letzteren besteht zwischen den aufeinanderfolgenden Stoßparametern der Teilchen keine Korrelation. Dieser Punkt wird

bei der Diskussion der Proportionalitätskonstanten k näher beleuchtet. Eine Besonderheit ist die Durchquerung eines polykristallinen Mediums durch ein Ion. Denn hier macht sich je nach Größe und Lage der Kristallite eine Abweichung von einer amorphen Targetatomanordnung bemerkbar. Allgemein läßt sich sagen, daß der Gitterführungseffekt einen um so geringeren Einfluß hat, je kleiner die Korngröße im Verhältnis zur Bahnlänge des Ions ist. Für die in dieser Arbeit verwendeten polykristallinen Goldfilme ist der mittlere Korndurchmesser von der Größe der Dicke der Filme (Abb. 8). Wie Abb. 20 zeigt, ist der Energieverlust für den Polykristall unabhängig von der Einschußrichtung. Dies bedeutet, daß im Einschußbereich keine Vorzugsrichtung (Textur) vorlag. Daß jedoch eine Mittelung über Gitterführung in verschiedenen Kristallrichtungen vorliegt, läßt die schmälere Intensitätsverteilung in Abb. 27 im Vergleich zu den Verteilungen des amorphen und polykristallinen Targets, die mit dem Computersimulationsprogramm Marlowe erzeugt wurden, vermuten. Letzterer Vergleich mit "Marlowe" ist wegen der nicht wohl definierten Eigenschaft "polykristallin" problematisch.

Zur Bestimmung des differentiellen Energieverlustes aus der Analyse unter $\vartheta = 0^{\circ}$ wurde angenommen, daß die Dicke des Films der Bahnlänge der analysierten Teilchen mit der wahrscheinlichsten Energie $E_1$ entspricht. Diese Annahme erhärten die gaußförmigen Intensitäts- und Energieverteilungen bei $\vartheta = 0^{\circ}$, die in den Abschnitten 3.3.1 und 3.3.4 besprochen sind.
Um einen Eindruck vom Bahnverlauf der Ionen im Kristall zu gewinnen, wurde die Transmission von Protonen durch amorphe, poly- und einkristalline Goldfilme für einige Fälle mit dem Computerprogramm "Marlowe" (Robinson et al, 1974) simuliert. Die Ionen können entweder statistisch oder gleichmäßig verteilt auf eine frei wählbare Oberfläche des aus einer Einheitszelle aufgebauten Kristalls mit vorgegebener

Energie, Einschußrichtung und Strahldivergenz eingeschossen werden. Ihre Bahnen ergeben sich aus den einzelnen Zweierstößen mit den Targetatomen. Für die klassische Berechnung dieser Stöße wird das Molière-Potential (Formeln (3) und (7)) angenommen. Bei nahezu symmetrischen Lagen von Targetatomen um das Projektil, wie sie beim Einschuß in offene Kristallrichtungen auftreten, ergibt die reine Zweierstoßrechnung zu starke Ablenkungen. Dies wird durch das Verfahren der simultanen Stöße korrigiert, das der Gesamtablenkung des Projektils die normierte vektorielle Summe der Einzelablenkungen für eine solche Konstellation von Targetatomen zuordnet. Ionen, die den Kristall verlassen, können nach Energie und Richtung analysiert werden. Bei jedem der elastischen Stöße des Ions mit einem Targetatom wird ein elektronischer Energieverlust abgezogen. Für diese Arbeit wurden die experimentellen Werte für dE/dx aus Abb. 21 und 22 angesetzt. Die Strahldivergenz und der Öffnungswinkel des Detektors wurden wie im Experiment gewählt. Ein amorphes Target wird durch zufällige isotrope Drehungen der Einheitszelle simuliert. Eine polykristalline Anordnung von Targetatomen wird durch zufällige kleine Drehungen der Einheitszelle um die Einschußrichtung erzeugt. Dies entspricht einer Vorzugsrichtung eines realen Polykristalls. Sein Aufbau aus Kristalliten unterschiedlicher Größe und Orientierung ist aber damit nicht simulierbar. Der maximale Stoßparameter für die Targetatomsuche betrug für die ein- und polykristallinen Simulationen 2,5 Å.
Eine ausführliche Beschreibung des Programms "Marlowe" wird in den Arbeiten von Robinson et al. (1974) und Maderlechner (1976) gegeben. Von Maderlechner wurden die für die Zeichenprogramme nötigen Zusatzroutinen zu "Marlowe" erstellt.

Abbildung 29 zeigt für den Einschuß von 4 keV Protonen in die <001>-Richtung eines 600 Å dicken Goldfilms die Projektion der Bahnen auf eine zur (100) Ebene parallele Fläche. Die Projektionswerte der Einschußstoßparameter

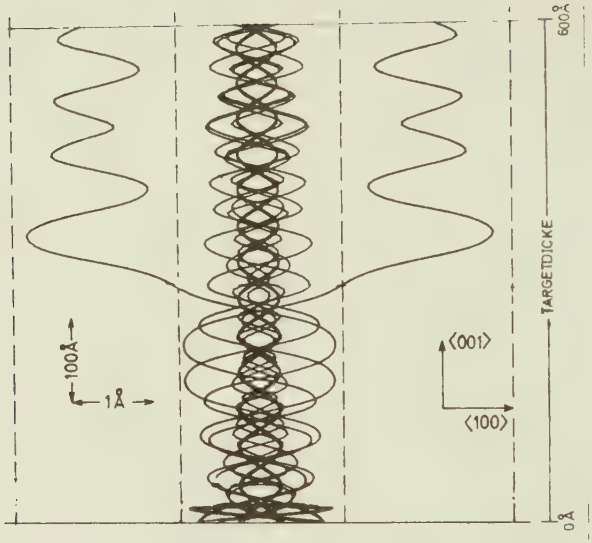


Abb. 29: Projektion von Protonenbahnen auf eine zur (100)-Ebene parallele Fläche für den Einschuß von 4 keV $H^+$ in die <001>-Richtung eines 600 Å dicken Goldkristalls, simuliert mit dem Computerprogramm "Marlowe". Die gestrichelten Linien sind die Projektionen der <001>-Ketten auf der Zeichenebene.

auf diese Ebene kann man auf der 0 Å-Linie, die die Projektion der Eintrittsebene für die Ionen in den Kristall ist, aus Abb. 29 ablesen. Die in der Zeichenebene liegenden Kristallrichtungen <001> und <100> sind dort ebenfalls eingezeichnet. Die für die gleiche Simulation sich ergebende Bahnprojektion auf eine zur (001) Ebene parallele Fläche zeigt Abb. 30. Hier sind die Targetatome, die die <001> Kanäle bilden, eingezeichnet. Ihr Radius entspricht

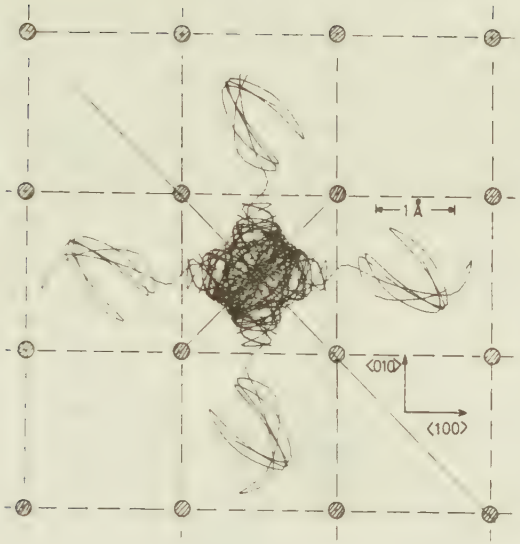


Abb. 30: Projektion von Protonenbahnen auf eine zur (001)-Ebene parallele Fläche für die gleiche Simulation wie in Abb. 29.

etwa der Abschirmlänge $a_L$. Die Bahnprojektionen in den Abb. 29 und 30 demonstrieren, daß die unter großen Stoßparametern, d.h. b $\gtrsim$ 0,7 Å in <001> eingeschossenen Protonen, gittergeführt werden. Dabei tritt in Abhängigkeit des Anfangsstoßparameters sowohl axial channeling als auch proper channeling auf. Abbildung 29 zeigt deutlich den sinoidalen Bahnverlauf. Diese Abbildung zeigt ferner ein interessantes Phänomen. Dieses besteht in der Stabilisierung der geführten Bahnen infolge der Vergrößerung des kritischen Winkels mit wachsendem elektronischem Energieverlust.

Den Einfluß von Gitterschwingungen auf die Gitterführung demonstriert Abb. 31 für die gleiche Simulation, die der Abb. 29 zu Grunde liegt. Dabei wurde eine Temperatur von

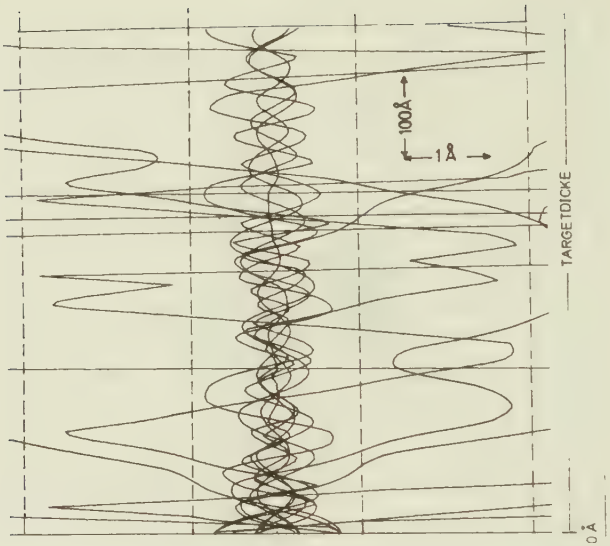


Abb. 31: Projektion von Protonenbahnen auf eine zur (100)-Ebene parallele Fläche für den Einschuß von 4 keV $H^+$ in die <001>-Richtung eines 600 Å dicken Goldkristalls mit Berücksichtigung von Gitterschwingungen bei T = 300 K, simuliert mit dem Computerprogramm "Marlowe". Die gestrichelten Linien sind die Projektionen der <001>-Ketten auf die Zeichenebene.

300 K angenommen. Dies führt über die Debyetemperatur von Gold von 165 K zu einer Atomauslenkung (r.m.s.) von der Größe der Abschirmkonstante $a_L$.
Die Abb. 31 macht deutlich, daß nur mehr die am besten geführten Teilchen im Kanal verbleiben. Axiale Gitterführung wird hier im Gegensatz zu Abb. 29 nicht mehr beobachtet. Die starke Störung durch die simulierten Gitterschwingungen läßt vermuten, wie komplex die Bahnverläufe der Ionen im Realkristall sind, wenn man zusätzlich noch bedenkt, daß

hier noch weitere Störeinflüsse wie Gitterfehler und Adsorbatschichten hinzukommen.
Den Bahnverlauf der Protonen für eine polykristalline Targetanordnung für die sonst gleichen Simulationsgrößen, wie sie der Abb. 29 zu Grunde liegen, zeigt Abb. 32. Hier sieht man deutlich die Aufweitung des ursprünglich parallelen Strahls durch Vielfachstreuung, wobei für 37 % der Teilchen sich noch eine ziemlich geradlinige Transmission ergibt.

Abb. 32: Projektionen von Protonenbahnen auf eine zur Einschußfläche parallele Fläche für den senkrechten Einschuß von 4 keV $H^+$ in ein polykristallines Target der Dicke 600 Å, simuliert mit dem Computerprogramm "Marlowe".

Die Computersimulation ergibt für das Verhältnis von Targetdicke zur Bahnlänge für die geführten Teilchen etwa einen Wert von 0,95 und für die schwach abgelenkten Teilchen

im polykristallinen Target etwa einen Wert von 0,9. Dies bedeutet, daß infolge der kleinen Ablenkwinkel die Dicke für die wahre Bahnlänge eine gute Näherung ist.

Eine weitere Möglichkeit, Informationen über die Gitterführung der Projektile in den einkristallinen Targets zu gewinnen, besteht in dem Vergleich der experimentellen Intensitätsverteilungen mit den über die Computersimulation erhaltenen Verteilungen. Außerdem kann man aus diesen Verteilungen einen kritischen Winkel definieren, der mit den theoretischen kritischen Winkeln verglichen werden kann.
Definiert man den experimentellen kritischen Winkel $\psi_c^e$ als den Schnittpunkt der Flanke der Winkelverteilungen mit der Winkelachse (Andreen et al. 1966 und 1967), so ergeben sich aus den Abb. 25 und 26 folgende Werte für den kritischen Winkel, die mit den theoretischen Werten nach Beziehung (44) und (47) in Tab. 7 verglichen werden. $\psi_c^M$ ist dabei die Bezeichnung für die nach obigem Verfahren aus den "Marlowe-Verteilungen" bestimmten kritischen Winkel. Die theoretischen Werte wurden für die mittlere Energie $\bar{E}$ bestimmt.

| <ijk> | $\bar{E}$ [keV] | $\psi_c^e$ | $\psi_c^a$ | $\psi_c^H$ | $\psi_c^M$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 100 | 4,4 | $6,5^o$ | $6^o$ | $2^o$ | $4^o$ |
| | 12,5 | $5,5^o$ | $4,6^o$ | $1,1^o$ | $4^o$ |

Tab. 7: Experimentell bestimmte kritische Winkel im Vergleich mit Marlowe und den theoretischen Werten nach Lindhard.

Dieser Vergleich ergibt eine gute Übereinstimmung mit den kritischen Winkeln für axiale Gitterführung. Dies stimmt überein mit dem Ergebnis der experimentellen Untersuchung von Andreen et al. (1966 und 1967), die den kritischen Winkel für H, D und He als Funktion der Energie in den

Kristallrichtungen <001>, <011> und <112> von Gold bestimmte. Das Auftreten von Hyperchanneling in der Simulation mit "Marlowe", wie die Abb. 29, 30 und 31 demonstrieren, zeigt sich auch in den Werten $\psi_c^M$, die zwischen den Werten $\psi_c^H$ und $\psi_c^a$ liegen.

Bei diesen Vergleichen ist zu beachten, daß dies nur sehr grobe Abschätzungen sind. So ist der Einfluß der realen Targeteigenschaften und der des großen Energieverlustes auf den Gitterführungsprozeß theoretisch nicht abgeklärt. Auch ist unklar, wie gut die in Marlowe angewandte Zweierstoßnäherung mit simultanen Stößen die reale Gitterführung beschreibt.

Um ein Gefühl für die Ablenkwinkel und kleinsten Stoßabstände als Funktion der Energie und des Stoßparameters zu erlangen, wurden diese für Zweierstöße eines Protons mit einem Goldatom mit dem Wechselwirkungspotential (7) als Funktion der Energie und des Stoßparameters berechnet. In Abb. 33 ist der kleinste Stoßabstand s als Funktion der Protonenenergie für drei ausgewählte Stoßparameter b aufgetragen. Sie zeigt, daß für Stoßparameter $b \gtrsim 0{,}5$ Å nahezu $s = b$ für $2 \leq E \leq 19$ keV gilt. Die Abhängigkeit des Streuwinkels $\vartheta$ von der Energie für drei ausgewählte Stoßparameter zeigt Abb. 34. Hier ergibt sich auch noch für große Stoßparameter für Energien $E < 8$ keV eine mit fallender Energie stark wachsende Ablenkung des Protons. Die Abb. 33 und 34 sind auch für D und He qualitativ charakteristisch. Andererseits analysiert man in der Detektorstellung $\vartheta = 0^\circ$ gerade diejnigen Teilchen, die nahezu geradlinig das Target durchquert haben. Dies wurde in den Abb. 29 und 32 demonstriert und wird auch durch die gaußförmigen Winkel- und Energieverteilungen in Abschnitt 3.3.4 und 3.3.1 erhärtet. Da jedoch der Bahnverlauf der Ionen im Realkristall nicht bekannt ist, kann man über die Abb. 29, 32 und 34 die Stoßparameter die-

ser Teilchen nur grob zu b $\gtrsim$ 0,5 Å abschätzen. Die Abhängigkeit des Streuwinkels $\vartheta$ von der Energie und dem

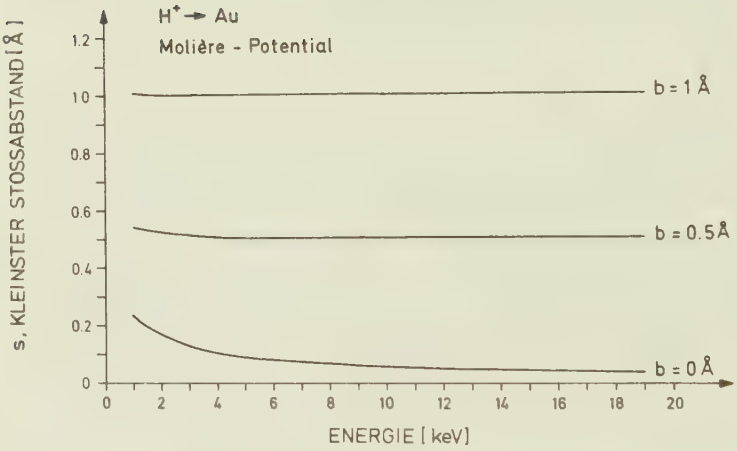


Abb. 33: Kleinster Stoßabstand in Abhängigkeit von Energie und Stoßparameter für den Stoß eines Protons mit einem Goldatom.

Stoßparameter b führt bei der Transmission von Ionen durch dünne Filme zu einer mit steigender Dicke und fallender Primärenergie zunehmenden Austilterung von Teilchen mit kleinen Stoßparametern aus dem unter $\vartheta = 0^{\circ}$ austretenden Teilchenstrahl.

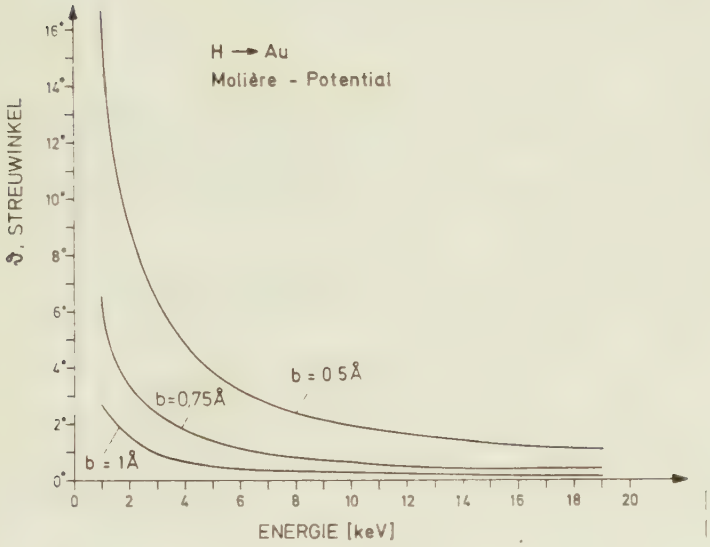


Abb. 34: Streuwinkel in Abhängigkeit von Energie und Stoßparameter für den Stoß eines Protons mit einem Goldatom.

Für gittergeführte Ionen ergibt sich infolge der Vergrößerung des kritischen Abstandes mit fallender Energie nach Formel (45) ebenfalls eine zunehmende Ausfilterung von Teilchen mit kleinem Stoßparameter, hier jedoch schon beim Einschuß in das Target. Die Ausfilterung von Teilchen mit kleinen Stoßparametern verschiebt sich natürlich für fallende Energie in Richtung größerer Stoßparameter.

Dies sind wichtige Schlußfolgerungen für die Interpretation der Abweichung des elektronischen Energieverlustes von der v-Proportionalität in Abschnitt 4.4.4.

## 4.2 Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit der Theorie

In der Diskussion wird zwischen zwei Energiebereichen unterschieden:

1) Der Energiebereich, in dem dE/dx zur Geschwindigkeit proportional ist, d.h. wo die über Formel (19) bestimmten k-Werte unabhängig von v sind. Für $H^+$ ist dies nach Abb. 16 für Energien $\bar{E} > 8$ keV und für $D^+$ für Energien $\bar{E} > 16$ keV der Fall. Für $He^+$ konnte für diesen Bereich, d.h. für Energien $\bar{E} > 32$ keV, ein k-Wert nur extrapoliert werden. Dies entspricht Ionengeschwindigkeiten $v > 0{,}5\ v_o$.

2) Der Energiebereich, in dem dE/dx nicht mehr proportional zur Geschwindigkeit ist, d.h. für Energien $\bar{E} < 8$ keV für $H^+$, $\bar{E} < 16$ keV für $D^+$ und $\bar{E} < 32$ keV für $He^+$ bzw. $v < 0{,}5\ v_o$.

### 4.2.1 Vergleich der Proportionalitätskonstanten aus Theorie und Experiment

Für den Vergleich mit dem Experiment wird für Protonen die lineare Response-Theorie mit exponentieller Abschirmung, Gleichungen (28) und (31) und Abb. 3, und für Helium die allgemeine lineare Response-Theorie, Abb. 2, nach Ferrell und Ritchie herangezogen. Diese beinhalten die lokale Abschirmung des Ionenpotentials durch die Valenzelektronen. Letztere für $He^+$ die Berücksichtigung der Abschirmung durch die Bindung eines Elektrons. Beide Theorien beziehen sich auf einen großen Elektronendichtebereich, d.h. für Wigner-Seitz-Radien $r_s$ zwischen 0,1 und 6 [a.E.].

In Tab. 8 sind für ein polykristallines Target und für die Kristallrichtungen <100> und <110> die experimentellen k-Werte für den Bereich in dem dE/dx zur Geschwindigkeit proportional ist für $H^+$ und $He^+$ mit den theoretischen Werten nach Gl. (28), (31) und Abb. 2 für eine Valenzelektronendichte von $n = 0{,}484/\text{Å}^3 = 0{,}071$ [a.E.] verglichen. Diese Dichte entspricht nach Gl. (34) einem Wigner-Seitz-Radius

| Ion | <ijk> | k [$\sqrt{eV}/\text{Å}$] | | $r_s$ [Å] | n [$1/\text{Å}^3$] |
|---|---|---|---|---|---|
| | | Exp. | Theorie | Exp. | Exp. |
| $H^+$ | (Poly) | 0,128 | | 0,22 | 21,75 |
| | <100> | 0,100 | 0,057 | 0,34 | 5,80 |
| | <110> | 0,093 | | 0,42 | 3,10 |
| $He^+$ | (Poly) | 0,117 | | 0,44 | 2,56 |
| | <100> | 0,110 | 0,052 | 0,47 | 2,16 |

Tab. 8: Vergleich der experimentellen k-Werte für $H^+$ und mit den theoretischen Werten nach Ferrell und Ritchie für $r_s = 1{,}49$ [a.E.]. Elektronendichten und Wigner-Seitz-Radien bestimmt aus den experimentellen k-Werten und der Theorie.

$r_s$ = 1,49 [a.E.] , einer effektiven Valenzelektronenzahl von 8,2 pro Atom (Atomdichte in Gold $n_a = 0{,}059/Å^3$ und einer Fermigeschwindigkeit $v_F = 1{,}28\ v_o$. Dieser Dichtewert wurde über die experimentell bestimmte Plasmonenenergie von Gold (Gl. 40), $\hbar\omega_p$ = 25,8 eV (Isaacson, 1975) bestimmt. Außerdem enthält Tab. 8 die unter Annahme der Gültigkeit der Theorie sich aus den experimentellen k-Werten ergebenden Werte für den Wigner-Seitz-Radius und die Elektronendichte. Dies ist möglich, da nicht sicher ist, ob n = 0,071 [a.E.] für den Energieverlust durch Einzelanregung (siehe Abschn. 2.2) die richtige Dichte ist.
Eine Diskussion der k-Werte von $D^+$ erübrigt sich, da diese wie in Abschnitt 3.3.2 bezüglich des elektronischen Energieverlustes die gleichen Werte ergeben.
Der Vergleich in Tab. 8 zeigt, daß die experimentellen k-Werte sowohl für Wasserstoff als auch für Helium um etwa den Faktor 2 höher sind als die theoretischen k-Werte für $r_s$ = 1,49 [a.E.] . Geht man von der Gültigkeit der Theorie von Ferrell und Ritchie aus, so ergeben sich zwei wichtige Schlußfolgerungen:

1) Die mittlere Elektronendichte in den Bereichen, die von den Bahnen der Teilchen berührt werden, ist wesentlich höher als der durch $r_s$ = 1,49 [a.E.] angesetzte Dichtewert. Solche hohen Elektronendichten können nur durch eine starke Lokalisierung der Valenzelektronen in diesen Bereichen zustandekommen. Ähnlich hohe Dichten ergeben auch die anderen in Abb. 3 dargestellten Theorien. Wie bereits in Abschnitt 2.2 angesprochen, ergibt die lineare Theorie keine Plasmonenanregung für $v < v_F$, jedoch ist theoretisch nicht abgeklärt, inwieweit Prozesse höherer Ordnung, wie Streuung eines Protons an den Metallionenrümpfen verbunden mit der Emission eines Plasmons und Erzeugung einer Kette von Polarisationsblasen (Elektronen-Löcher-Paare) durch ein Proton, verbunden mit elastischer Streuung eines der Elektronen oder Löcher

(Ferrell und Ritchie, 1977) einen wesentlichen Plasmonenbeitrag zum Energieverlust ergeben. Für den ersteren Prozeß finden Ferrell und Ritchie, daß er für langsame Protonen vernachlässigbar ist.
Die Elektronendichten, die sich aus den Messungen am Polykristall und entlang der <100>- und <110>-Richtungen ergeben, verhalten sich wie 1 : 0,26 : 0,14. Dabei ist allerdings zu bedenken, daß der Unterschied zwischen dem polykristallinen Wert und den einkristallinen Werten wegen des Fehlers von 12 % für diese k-Werte (Abschn. 3.3.2) nach Abb. 3 mit einem großen Fehler verbunden ist. So ergibt sich für den polykristallinen Dichtewert ein Fehler von etwa 55 %. Der Unterschied zwischen dem <100>- und <110>-Dichtewert ist jedoch vom Dickenfehler unabhängig (Abschn. 3.3.2), sodaß sich ein deutlicher Einfluß des Bahnverlaufs der Teilchen auf den Energieverlust zeigt. Dies weist ebenfalls auf eine Lokalisierung der Valenzelektronen im Raumbereich der Ionenbahnen hin.

2) Unter der Voraussetzung, daß die Annahmen für die Extrapolation der k-Werte von He für $\bar{E} > 32$ keV richtig sind, kann man aus dem Verhältnis der experimentellen k'-Werte von $He^+$ zu $H^+$ die für den Energieverlust von $He^+$ wirksame (effektive) Ladung $Z_1^+$ bestimmen. Dabei geht man von der $Z_1^2$-Abhängigkeit des elektronischen Energieverlustes aus. Für $H^+$ wurde dabei $Z_1 = 1$ gesetzt (siehe Abschn. 4.2.2.1). Das Verhältnis $k'_{He}/k'_H = 1,85$ für den Polykristall ergibt für $He^+$ eine wirksame Ladung $Z_1^+ = 1,36$ und das Verhältnis $k'_{He}/k'_H = 2,22$ für die <100>-Richtung ein $Z_1^+ = 1,48$. Diese Werte sind infolge des Extrapolationscharakters der $k'_{He}$-Werte und des Fehlers von 12 % in den k-Werten für $H^+$ nur ein grober Anhaltspunkt für die Bestätigung der allgemeinen linearen Response-Theorie von Ferrell und Ritchie, die im Dichtebereich von $r_s = 0,5$ bis 1 [a.E.] ein $Z_1^+ = 1,8$ bis 1,4 ergibt (Abb. 2).

Um ein Gefühl für die Elektronenverteilung im Goldfestkörper zu bekommen, die Radialwellenfunktionen sind unbekannt, sind in Abb. 35 die mittleren radialen Elektronendichten für das 4f, 5s, 5p und 5d Niveau des freien Goldatoms als Funktion des auf die Bohrsche Länge $a_o$ normierten Abstandes vom Kern aufgetragen. Die Verteilungen wurden als den Tabellen von Herman und Skillmann (1963) über die Beziehung $n(r) = w_{n\lambda} P_{nx}/4\pi r^2$ berechnet; $P_{n\lambda}$ sind die normierten Radialwellenfunktionen der Zustände

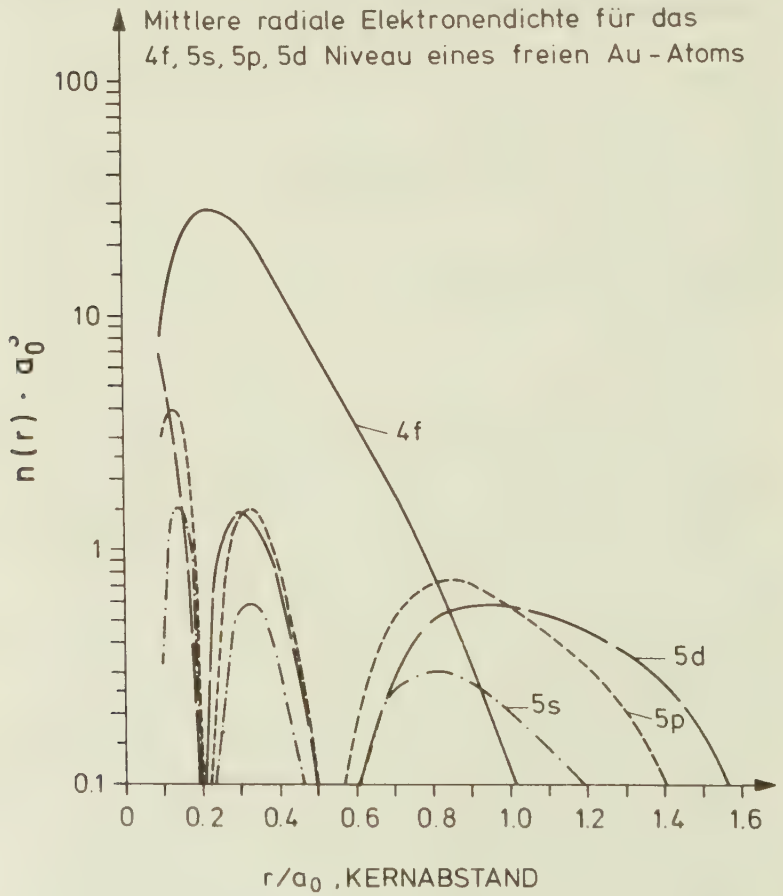


Abb. 35: Mittlere radiale Elektronendichte als Funktion des Kernabstandes für ein freies Goldatom nach den tabellierten Radialwellenfunktionen von Herman and Skillman (1963).

$(n\lambda)$, n ist die Hauptquantenzahl, $\lambda$ die Drehimpulsquantenzahl und $w_{n\lambda}$ ist die Besetzungszahl des Zustandes $(n\lambda)$. Diese Elektronendichteverteilung des freien Goldatoms liefert natürlich nur ein grobes, jedoch realistischeres Bild als das statistische Atommodell von Thomas und Fermi für die Verteilung der Valenzelektronen im Festkörper. Aus diesem Grunde wurde das 6s-Niveau nicht in Abb. 35 eingezeichnet, da es das am wenigsten lokalisierte Valenzelektron ist.
Aus dem Vergleich der Dichtewerte aus Tab. 8 mit den Dichteverhältnissen in Abb. 35 und unter der Berücksichtigung, daß die Teilchen, deren Energieanalyse zu den Werten in Tab. 8 führte (nach Abschnitt 4.1), Stoßparameter $b \gtrsim 0{,}5$ Å hatten, ergibt sich der Hinweis, daß im Festkörper eine ähnlich starke Lokalisierung der 5s, 5p und 5d-Elektronen wie im freien Atom vorliegt. Dies muß vor allen Dingen für die Elektronen hohen Drehimpulses so sein (Hurd, 1975).

### 4.2.2 Interpretation der experimentellen Abweichung des elektronischen Energieverlustes von der v-Proportionalität

Für die Interpretation der experimentell gefundenen Abweichung des elektronischen Energieverlustes von $H^+$, $D^+$ und $He^+$ in Au ergaben sich zwei Ausgangspunkte:

1) Die Ladung des Projektils ist keine Konstante, sondern eine Funktion der Geschwindigkeit.

2) Die Lokalisierung der Valenzelektronen, verbunden mit den starken Änderungen der Ionenbahnen mit fallender Energie führen bei der Analyse unter $\vartheta = 0^\circ$ zu einer zunehmenden Auswahl von Teilchen, die immer kleinere Elektronendichten durchlaufen und damit einen immer kleineren Energieverlust erlitten haben.

4.2.2.1 Effektive Ladung des Projektilions

Nach Brandt (1975) ist ein Ion, das sich mit der Geschwindigkeit $v < v_F$ durch ein Elektronengas der konstanten Dichte n bewegt, näherungsweise wie ein im Elektronengas ruhendes Ion abgeschirmt. Für diesen statischen Fall berechnet er für den Dichtezuwachs (enhancement) $\Delta n$ in der Umgebung der positiven Punktladung

$$\Delta n_{stat}(r) = (Z_1/4\pi\, a_{TF}^2 r)\, e^{-r/a_{TF}} \qquad (54)$$

wobei $a_{TF} = r_s^{1/2} a_o/1{,}56$ die Abschirmlänge ist. Diesem Dichtezuwachs entspricht ein exponentiell abgeschirmtes Potential des Ions vom Typ (32), jedoch mit der Abschirmlänge $a_{TF}$. Ein solches Potential liegt aber gerade der linearen Response-Theorie mit exponentieller Abschirmung von Ferrell und Ritchie (Abschn. 2.2) infolge ihrer Approximation für die Dielektrizitätskonstante $\varepsilon(k,\omega)$ zugrunde. Die durch die Abschirmung sich ergebende effektive Ladung ist damit bereits in Formel (31) berücksichtigt. Für die Beziehung (28) ist deshalb für Protonen $Z_1 = 1$ zu setzen. Für Ionengeschwindigkeiten $v > v_F$ erhält Brandt für den Dichtezuwachs durch die das Ion umgebende Ladungswolke näherungsweise

$$\Delta n = \Delta n_{stat} \left[ 1 - e^{-t/\tau} \right] \qquad (55)$$

Dabei ist $\tau$ die Relaxationszeit des Elektronengases und $t \approx a_{TF} v^{-1}$ die Zeit der Störung. Für $v < v_F$ folgt damit aus (55) $n \approx n_{stat}$ und für $v > v_F$ $\Delta n \approx (v_F/v)\, \Delta n_{stat}$. Für $v > v_F$ ergibt sich demnach eine mit zunehmender Geschwindigkeit abnehmende Abschirmung bzw. zunehmende effektive Ladung des Ions.

Die Geschwindigkeitsabhängigkeit der effektiven Ladung für $v_o \leq v \lesssim 3v_o$ wurde durch Rechnungen von Yarlagadda et al. (1978) auf der Grundlage der Theorie von Brandt bestätigt. Jedoch betonen sie, daß eine Ausdehnung ihrer Theorie auf den Bereich $v < v_o$ einer physikalischen Grundlage entbehrt.

Die Abschirmung der Kernladung $Z_1$ eines Ions durch gebundene Elektronen im Metall berücksichtigen Ferrell und Ritchie in ihrer allgemeinen linearen Response-Theorie. Ihr Ergebnis für $He^+$ wurde bereits in Abschnitt 2.2 dargelegt. Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß im Rahmen der von Brandt angegebenen Näherungen für die Abschirmung eines Ions der Geschwindigkeit $v < v_F$ in einem Elektronengas der konstanten Dichte n sich keine Geschwindigkeitsabhängigkeit der effektiven Ladung ergibt. Die sich ergebende statische Abschirmung ist bereits in der linearen Response-Theorie mit exponentieller Abschirmung von Ferrell und Ritchie berücksichtigt. Auch die in ihrer allgemeinen Response-Theorie berücksichtigte Abschirmung des Ions durch gebundene Elektronen ist geschwindigkeitsunabhängig. Aus diesen Gründen ist es nicht wahrscheinlich, daß die im Experiment gefundene Abweichung des Energieverlustes von $H^+$ und $He^+$ in Au für $v < 0{,}5\ v_o = 0{,}3\ v_F$ (für $r_s = 1{,}49$ [a.E.]) eine Folge einer geschwindigkeitsabhängigen effekten Ladung $Z_1^+$ ist.

4.2.2.2 Inhomogenität des Valenzelektronengases

Eine im Mittel räumlich konstante Elektronendichte, wie sie bei der Ableitung der v-Proportionalität des elektronischen Energieverlustes in den verschiedenen Theorien (Abschnitt 2.2) vorausgesetzt wird, ist nur zu erwarten, wenn die Valenzelektronen nahezu frei sind oder im Falle einer starken Lokalisierung derselben, wenn die mittleren Abstände der Bahnen der analysierten Teilchen ( $\vartheta = 0^\circ$) von den Targetatomen für den gesamten untersuchten Energiebereich etwa gleich groß sind.

Wie schon die Diskussion des Energieverlustes im Energiebereich, in dem er zur Geschwindigkeit proportional ist, in Abschnitt 4.2.1 gezeigt hat, ergibt sich aus den experimentellen k-Werten eine starke Lokalisierung der Valenzelektronen im Ortsbereich $r \gtrsim 0{,}5$ Å. Die Betrachtungen in Abschnitt 4.1 über die Abhängigkeit des Streuwinkels und des kleinsten Stoßabstandes von der Energie und dem Stoßparameter für einen Zweierstoß und die Energieabhängigkeit des kritischen Abstandes für gittergeführte Ionen, zeigen jedoch deutlich, daß mit fallender Energie eine zunehmende Ausfilterung von Teilchen mit kleinen Stoßparametern aus dem unter $\vartheta = 0^{\circ}$ analysierten Teilchenstrahl erfolgt. Es bleiben also bei abnehmender Energie nur Teilchen, deren Bahnen in zunehmenden größeren Abständen von den Atomkernen verlaufen, im vom Detektor erfaßten Strahl. Dies führt aber gerade dazu, daß das Ion in Abhängigkeit seiner Energie Bereiche unterschiedlicher Elektronendichte durchläuft und es damit zu einer Abweichung von der Geschwindigkeitsproportionalität des gemessenen elektronischen Energieverlustes kommt.

Für die niedrigste Energie $\bar{E} = 750$ eV, für die ein k-Wert für Protonen bestimmt wurde, ist es demnach sehr wahrscheinlich, daß nur mehr die am schwächsten lokalisierten 6s Elektronen zum Energieverlust beitragen. Nimmt man diese als völlig frei an, so erhält man eine Elektronendichte von $n = 8{,}73 \cdot 10^{-3}$ [a.E.] . Aus dem experimentellen k-Wert für 750 eV ergibt sich über die lineare Response-Theorie mit exponentieller Abschirmung, Gl. (28) und (31), eine Elektronendichte von $8{,}84 \cdot 10^{-3}$ [a.E.] . Diese gute Übereinstimmung erhärtet obige Interpretation der Abweichung des experimentellen Energieverlustes von der Geschwindigkeitsproportionalität. Außerdem ist sie eine gute Bestätigung der linearen Response-Theorie von Ferrell und Ritchie.

Nach dieser Interpretation entspricht jeder Punkt in Abb. 16 einem k-Wert des v-proportionalen Energieverlustes für die jeweils von den Teilchen durchlaufene Elektronendichte.
Die zunehmende Verringerung der mittleren Elektronendichte in Gebieten, in denen die Ionenbahnen der Teilchen mit fallender Energie verlaufen, führt nach der allgemeinen linearen Response-Theorie (Abb. 2) für $He^+$ infolge der Verkleinerung der effektiven Ladung durch die wachsende Abschirmung durch das gebundene Elektron zu einer zusätzlichen Verkleinerung des Energieverlustes. Das Experiment zeigt innerhalb der Fehlergrenzen die gleiche Abweichung für $H^+$ und $He^+$. Aus diesem Grunde und der Tatsache,daß die effektive Protonenladung nicht aus k(E) folgt, wurde eine Berechnung der effektiven Ladung für $He^+$ aus den experimentellen k-Werten in diesem Energiebereich nicht durchgeführt.
Die von Overbury et al. (1979) für die Transmission von $H^+$ und $D^+$ mit Primärenergien zwischen 400 und 5000 eV durch Kohlenstoffilme beobachtete v-Proportionalität ist sehr wahrscheinlich eine Folge der wesentlich anderen Elektronenkonfiguration (zwei 1s, zwei 2s und zwei 2p Elektronen) als in Gold.
Der starke Bahneinfluß auf den Energieverlust für niedrige Energien schränkt die praktische Bedeutung der gemessenen dE/dx-Werte im Vergleich zu den dE/dx-Werten bei höheren Energien ein. Eine Bestimmung einer totalen Energieverteilung, d.h. für alle unter den verschiedenen Winkeln $\vartheta$ austretenden Teilchen nach dem Durchlaufen einer Targetstrecke t ist jedoch wegen der großen Bahnlängenunsicherheit der analysierten Teilchen nicht sinnvoll. Für polykristalline Targets könnte in diesem Fall ein Mittelwert der Verteilung für die Bestimmung eines mittleren Energieverlustes herangezogen werden. Jedoch ist die Zuordnung einer mittleren Bahnlänge für diesen Wert sehr problematisch. Für ein einkristallines Target ist ein solches Verfahren wegen der sehr unterschiedlichen Bahnverläufe (channeling-, dechanneling-, random-Bahnen) noch zweifelhafter.

### 4.2.3 Energie-Straggling

Diese starke Stoßparameterabhängigkeit des elektronischen Energieverlustes muß sich auch in der Energieverbreiterung als dominierender Effekt für die verschiedenen kristallographischen Fälle zeigen. Allerdings ist hier der Einfluß durch eine Reihe zusätzlicher Effekte komplexer:

Für die Energieverbreiterung (Energystraggling) sind folgende Einflüsse zu erwarten:

1) Fluktuationen der Bahnlänge
2) Statistik des elastischen Energieverlustes
3) Statistik des Fermigases
4) Dickeninhomogenitäten der Targets
5) Stoßparameterabhängigkeit des elektronischen Energieverlustes.

Die Punkte 1) und 2) können nach den in Abschnitt 4.1 gemachten Untersuchungen ausgeschlossen werden. Die Statistik des Fermigases ist approximativ durch die Formel von Lindhard (39) beschrieben. Sie ist in Abb. 24 für den Wert $r_s = 1{,}49$ [a.E.] (Isaacson, 1975) - was einer Zahl von 8,2 freien Elektronen pro Atom entspricht - und der Annahme von 1 für die Proportionalitätskonstante eingetragen.

Die Verbreiterung der Energie durch die Dickeninhomogenitäten läßt sich wie folgt gewinnen: Nimmt man eine gaußförmige Verteilung der Dicke t mit der Halbwertsbreite $\Delta t$ an, so ergibt sich nach Beziehung (49) ein Unterschied in der Endenergie nach Durchquerung des Targets von

$$(55) \qquad \Delta E = E_1(\bar{t}-\Delta t) - E_1(\bar{t}) = \frac{dE_o}{dt}\Delta t - \frac{k^2}{2}\bar{t}\Delta t + \frac{k^2}{4}(\Delta t)^2$$

$\bar{t}$ ist der wahrscheinlichste Wert der Dickenverteilung. Für $\Delta t << \bar{t}$ ergibt sich daraus näherungsweise

$$(56) \qquad \Delta E \approx \frac{dE_o}{dt}\Delta t = k\Delta t \cdot E_1(\bar{t}).$$

Die Beziehung (56) zeigt, daß Dickeninhomogenitäten einen großen Einfluß auf die Energieverbreiterung haben können. So ergibt sich z.B. für $t = 50$ Å für $k_{Poly} = 0{,}128$ (Tab. 5) und für $E_1 = 14$ keV ein Wert für $\Delta E$ von etwa 700 eV. Die Inhomogenität des Elektronengases (5), die sich aus den Betrachtungen in Abschnitt 4.2.1 und 4.2.2 ergab, führt zu einer weiteren Energieverbreiterung. Diese wurde nicht abgeschätzt, da erstens die Elektronendichteverteilung nur sehr grob abgeschätzt werden kann (Abschnitt 4.2.2), und zweitens die mikroskopischen Inhomogenitäten der Targets (Stufen), die für die Interpretation der Kurven in Abb. 24 nötig sind, nicht bekannt sind. Da die Rutherfordrückstreuung über ein Gebiet von 0,3 mm Ø mittelt, liefert sie keine Information über die mikroskopischen Inhomogenitäten.
Die stärker als linear mit der Energie abfallenden relativen Straggling-Werte in Abb. 24 können wegen der $E_1^{1/2}$-Abhängigkeit der Energieverbreiterung durch die unbekannten Inhomogenitäten der Targets nicht schlüssig durch eine mit fallender Energie kleiner werdenden wirksamen Elektronendichte wie in Abschnitt 4.2.2 interpretiert werden. Jedoch zeigen die für das polykristalline Target größten Werte und für die <110>-Richtung kleinsten Werte für das relative Straggling den Einfluß der Inhomogenität des Elektronengases.

## 5. Zusammenfassung

Der Energieverlust von $H^+$, $D^+$ und $He^+$-Ionen bei der Transmission durch poly- und einkristalline Goldfilme wurde für Primärenergien der Ionen von 2 bis 20 keV untersucht. Für die Bestimmung des differentiellen Energieverlustes wurden die unter $\vartheta = 0^\circ$ austretenden Teilchen analysiert. Dabei wurden erstmalig auch die neutral austretenden Teilchen erfaßt.

Es zeigte sich, daß der experimentell ermittelte Energieverlust für $H^+$, $D^+$ und $He^+$ im wesentlichen dem elektronischen Energieverlust entspricht. Dieses Ergebnis wurde aus dem Vergleich der experimentellen Energieverlustwerte mit den Werten des nuklearen Standardenergieverlustes und aus der Übereinstimmung der experimentellen Energieverlustwerte für $H^+$ und $D^+$ gewonnen.

Die Approximation der Bahnlänge der unter $\vartheta = 0^\circ$ analysierten Teilchen durch die Dicke des Targets erwies sich wegen der gaußförmigen Austrittswinkelverteilungen um $\vartheta = 0^\circ$ und durch Untersuchungen mit dem Computersimulationsprogramm "Marlowe" als gute Näherung. Das in Marlowe für große Stoßparameter auftretende Hyperchanneling konnte durch die für ausgewählte Energien experimentell bestimmten mittleren kritischen Winkel nicht bestätigt werden. Diese zeigten vielmehr eine gute Übereinstimmung mit den theoretischen kritischen Winkeln für axiale Gitterführung. Allerdings ist der Gitterführungseffekt bei so großen Änderungen der Querenergie, wie sie durch die großen Energieverluste in den Messungen dieser Arbeit auftreten, wesentlich komplexer,als er in der Theorie beschrieben wird.

Der experimentell bestimmte differentielle Energieverlust erwies sich für Ionengeschwindigkeiten $v > 0{,}5\ v_o$ als proportional zur Teilchengeschwindigkeit. Für diesen Bereich ergeben sich unter Annahme der Gültigkeit der linearen Response-Theorie mit exponentieller Abschirmung nach Ferrell und Ritchie (1977) aus der Proportionalitätskonstante k Elektronendichten, die durch eine starke Lokalisierung der Valenzelektronen erklärt werden können. Die Tatsache, daß sich für den Polykristall der größte k-Wert und für die <110>-Richtung der kleinste k-Wert ergibt, weist ebenfalls auf eine Inhomogenität des Metallelektronengases hin. Die Lokalisierung der Valenzelektronen im Bereich der Ionenbahnen wurde am Modell des freien Goldatoms als grobe Näherung für den Festkörperzustand demonstriert. Das im v-proportionalen Bereich bestimmte Verhältnis $k'_{He}\ k'_{H^+}$ deutet auf die Gültigkeit der allgemeinen linearen Response-Theorie von Ferrell und Ritchie, die die zusätzliche Abschirmung der Heliumkernladung durch das gebundene Elektron berücksichtigt, hin.

Die mit fallender Ionengeschwindigkeit zunehmende Abweichung des gemessenen Energieverlustes für Wasserstoff und Helium, die für $v < 0{,}5\ v_o$ sowohl für den Polykristall als auch für die Kristallrichtungen <100> und <110> in gleicher Weise beobachtet wurden, konnten qualitativ durch die Lokalisierung der Valenzelektronen und den Verlauf der Teilchenbahnen als Funktion der Energie erklärt werden. Die Erklärung dieser Abweichung durch eine geschwindigkeitsabhängige effektive Ladung erschien im Rahmen der Theorie von Brandt als unwahrscheinlich. Die Betrachtung von Zweierstößen eines Protons mit einem Goldatom in der Molièrschen Näherung des Wechselwirkungspotentials zeigte, daß sich auch noch für große Stoßparameter ein starkes Ansteigen des Streuwinkels für fallende Energie ergibt. Außerdem ergab sich, daß für große Stoßparameter der kleinste Stoßabstand für Energien zwischen 1 und 20 keV gleich dem Stoßparameter ist. Für ein amorphes Target ergibt sich dadurch eine mit

fallender Energie zunehmende Ausfilterung von Teilchen mit kleinen Stoßparametern aus dem unter $\vartheta = 0^{\circ}$ analysierten Strahl. Dies bedeutet, daß bei abnehmender Energie nur Teilchen, deren Bahnen in zunehmend größeren Abständen von den Atomkernen verlaufen, im vom Detektor erfaßten Strahl bleiben. Für gittergeführte Ionen führt die Energieabhängigkeit des kritischen Abstandes mit fallender Energie zu einer zunehmenden Einschnürung der Ionenbahnen auf Gebiete kleinerer Elektronendichten. Die damit über die Lokalisierung der Valenzelektronen sich ergebende unterschiedliche Elektronendichte für die Ionenbahnen bei verschiedenen Energien führt zur Abweichung des elektronischen Energieverlustes von der Geschwindigkeitsproportionalität.

Dieser starke Einfluß der Ionenbahnen auf den Energieverlust bedeutet eine Einschränkung der praktischen Bedeutung von dE/dx-Werten, da diese nur für ganz bestimmte mittlere Stoßparameter repräsentativ sind. Eine Messung der Energieverteilung sämtlicher aus dem Target austretenden Teilchen schafft wegen der großen Bahnunsicherheiten keine Abhilfe.
Das experimentell bestimmte relative Straggling für Protonen, das für den Polykristall die größten und für die <100>-Richtung die kleinsten Werte ergab, weist auch auf eine Lokalisierung der Valenzelektronen hin. Die Abweichung von der v-Proportionalität des theoretischen relativen Stragglings konnte jedoch durch die Unkenntnis der mikroskopischen Inhomogenitäten der Targets nicht diskutiert werden.

## 6. Literaturverzeichnis

H.H. Andersen, J.F. Ziegler, Hydrogen stopping powers and ranges in all elements, vol. 3 of stopping and ranges of ions in matter, ed. J.F. Ziegler, Pergamon Press, New York (1977)

C.J. Andreen, R.L. Hines, Phys. Lett. 24A, 118 (1966)

C.J. Andreen, R.L. Hinse, Phys. Rev. 159, 285 (1967)

H. Bätzner, Ann. Phys. 25, 233 (1936)

G.A. Bassett, D.W. Pashley, Journal of the Institute of Metals, 87, 449 (1959)

R. Behrisch, B.B. Kadomtsev, Proc. Int. Conf. Plasma Phys. and Controlled Nuclear Fusion, Tokyo (1974), and IAEA, Vienna (1975)

H.A. Bethe, Ann. d. Physik 5, 325 (1930)

R.S. Bhattacharya, W. Eckstein, H. Verbeek, Surface Science, 93, 563 (1980)

F. Bloch, Ann. d. Physik 16, 285 (1933)

N. Bohr, Phil. Mag. (6) 25, 10 (1913)

N. Bohr, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 18/8, (1948)

E. Bonderup, Penetration of Charged Particles through Matter, Lecture Notes, Institute of Physics, University of Aarhus, Denmark (1978)

W. Brandt, Atomic Collisions in Solids, Plenum Press, New York, 261 (1975)

G.L. Cano, J. Appl. Phys. 43, 1504 (1972)

D.H. Crandall, J.A. Ray, C. Cisneros, Rev.Sci.Instr. 46, 562 (1975)

G. Dearnaley, J.H. Freeman, R.S. Nelson, J. Stephen, Defects in Crystalline Solids, Vol. 8, North-Holland Publishing Company (1973)

W. Eckstein, H. Verbeek, Vacuum 23, 159 (1973)

C. Erginsoy, Phys. Rev. Lett. 15, 360 (1965)

E. Fermi, Z. f. Physik 48, 73 (1928)

E. Fermi, G. Teller, Phys. Rev. 72, 399 (1947)

T.L. Ferrell, R.H. Ritchie, Phys. Rev. B 16, 115 (1977)

J. Finnemann, Dissertation (The Institute of Physics, Aarhus University, 1968, unpublished)

O.B. Firsov, Zh. Eksp. Teor. Fys. 33, 696 (1957) (engl. Übers. Sov. Phys. JETP 6, 534 (1958))

O.B. Firsov, Zh. Eksp. Teor. Fys. 36, 1517 (1959) (engl. Übers. Sov. Phys. JETP 36, 1076 (1959))

P. Gombàs, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Springer-Verlag, Wien (1949)

Yu. V. Gott, V.G. Telkovskij, Rad.Eng.Electron,Phys. 7, 1913 (1962)

F. Herman, S. Skillman, atomic structure calculations, Prentice Hall (1963)

G. Högberg, H.Norden, R. Skoog, Phys.Stat.Sol. 42, 44 (1970)

C.M. Hurd, Electrons in Metals, J. Wily & Sons, New York (1975)

D. Isaacson, Internal Report, Radiation and Solid State Laboratory, New York University (1975)

C. Kittel, Einführung in die Festkörperphysik (1969)

L.D. Landau, J.Exptl. Theoret. Phys. (U.S.S.R.) 32, 59 (1957), engl. Übers. Soviet Phys. JETP 5, 101 (1957)

L.D. Landau, E.M. Lifschitz, Lehrbuch der theoretischen Physik III, Akademie-Verlag Berlin (1971)

C. Lehmann, G. Leibfried, J.Appl. Phys. 34, 2821 (1963)

J. Lindhard, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk 28/8 (1954)

J. Lindhard, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk 34/14 (1965)

J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 36/10 (1968)

J. Lindhard, M. Scharff, Phys. Rev. 124, 128 (1961)

J. Lindhard, M. Scharff, H.E. Schiøtt, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 33/14 (1963)

K. Lindhard, Aa. Winther, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 33/4 (1964)

H. Lutz, R. Sizmann, Phys. Lett. 5, 113 (1963)

G. Maderlechner, IPP-Report 9/20 (1976)

J.W. Mayer, E. Rimini, Ion Beam Handbook for Material Analysis, Academic Press, New York (1977)

K. Morita, H. Akimura, T. Suita, J.Phys.Soc. Japan 22, 1503 (1967)

A.H. Morton, D.A. Aldcroft, M.F. Payne, Phys. Rev. 165, 415 (1967)

R.S. Nelson, M.W. Thompson, Phil. Mag. 8, 1677 (1963)

T.S. Noggle, Nucl. Instr. and Meth. 102, 539 (1972)

A. Nomura, S. Kiyona, J. Phys. D8, 1551 (1975)

S.H. Overbury, P.F. Dittner, S. Datz, Rad. Effects, 41, 219 (1979)

G.R. Piercy, F. Brown, J.A. Davies, M. McCargo, Phys. Rev. Lett. 10, 399 (1963)

R.H. Ritchie, Phys. Rev. 114, 644 (1959)

M.T. Robinson, O.S. Oen, Phys. Rev. 132, 2385 (1963)

M.T. Robinson, I.M. Torrens, Phys. Rev. B9, 5008 (1974)

J. Roth, J. Bohdansky, W. Ottenberger, IPP-Report 9/26 (1979)

P. Sigmund, ENERGY LOSS OF CHARGED PARTICLES IN MATTER, Proceedings of the Advanced Study Institute on Radiation Damage Processes in Materials, Corsica (1973)

V.P. Silin, JETP 37, 273 (1959)

V.P. Silin, Sov. Phys. JETP 10, 192 (1960)

R. Sizmann, C. Varelas, Festkörperprobleme XVII (1977)

L.H. Thomas, Proc. Cambr. Phil.Soc. 23, 542 (1927)

D.A. Thompson,W.F.S. Poehlmann, Nuclear Instruments and Methods 168, 63 (1980)

I.M. Torrens, Interatomic Potentials, Academic, New York (1972)

B.A. Trubnikov, Yu.N. Yavlinskii, Zh.E.T.F. 48, 253 (1965) (engl. Übers. Sov.Phys. JETP 21, 167 (1965))

H. Verbeek, W. Eckstein, Proc. 7th Int. Vac. Congr. and 3rd Int. Conf. on Solid Surfaces, ed. R. Dobrozemsky, F. Rädenauer, F.P. Viehböck and A. Breth, Vienna, p. 1309 (1977)

H. Verbeek, W. Eckstein, R.S. Bhattacharya, Appl. Phys. F. 51 (1980)

W.D. Wilson, L.G. Haggmark, J.P. Biersack, Phys. Rev. B15, 2458 (1977)

B.S. Yarlagaddov, J.E. Robinson, W. Brandt, Phys.Rev. B17, 3473 (1978)

J.F. Ziegler, Helium stopping powers and ranges in all elemental matter, vol. 4 of stopping and ranges of ions in matter, ed. J.F. Ziegler, Pergamon Press, New York (1977)

J.F. Ziegler, W.K. Chu, Atomic and Nuclear Data Tables 13, 463 (1974).

Nach Abschluß dieser Arbeit danke ich:

Herrn Prof. Dr. R. Sizmann für die Unterstützung dieser Arbeit und für viele wertvolle Anregungen für die Diskussion dieser Arbeit.

Herrn Dr. W. Eckstein und Herrn Dr. H. Verbeek für ihre Hilfe bei der Vorbereitung und Durchführung der Experimente und für viele bedeutsame Anregungen und Diskussionen.

Herrn Dr. C. Varelas für die mit mir durchgeführten Diskussionen und für viele wertvolle Hinweise.

Herrn Prof. Dr. W. Brandt für die Diskussion am Ammersee, die die Interpretation der Messungen wesentlich beeinflußte.

Herrn Prof. Dr. H.H. Andersen für wichtige experimentelle und theoretische Hinweise.

Herrn Dr. K. Reichelt und Herrn M. Rey von der Kernforschungsanlage Jülich für die Herstellung der einkristallinen Filme und für die Einführung in deren Präparation.

Herrn Dr. M.T. Robinson für viele Hinweise bezüglich "MARLOWE" und theoretischen Aspekten der Energieverlusttheorie.

Herrn H. Kukral für die Herstellung der polykristallinen Goldfilme.

Herrn G. Maderlechner für die Unterstützung bei der Benutzung des Computersimulationsprogramms "MARLOWE"

Herrn R. Hippele und Herrn S. Schrapel für die technische Unterstützung bei der Durchführung der Experimente.

Allen am Zustandekommen dieser Arbeit beteiligten Mitarbeitern des Max-Planck-Institutes für Plasmaphysik.

# L e b e n s l a u f

Robert B l u m e , geb. am 26.11.1946
verheiratet, zwei Kinder

| | |
|---|---|
| 1953 - 1960 | Besuch der Volksschule in München |
| 1960 - 1963 | Besuch der Städt. Wirtschaftsaufbauschule in München |
| 1963 - 1966 | Kaufmännische Lehre in München |
| 1965 - 1969 | Besuch des Städt. Abendgymnasiums in München |
| 1969 | Ablegung der Reifeprüfung |
| 1969 - 1976 | Studium der Physik an der Universität München. Durchführung einer Diplomarbeit mit dem Thema "Bezugssystem, Zeit- und Längenmessung und Rotation in der allgemeinen Relativitätstheorie" bei Prof. Wellmann an der Universitätssternwarte |
| 1976 | Ablegung der Diplomprüfung |
| Ab 1.5.1976 | Durchführung der vorliegenden Doktorarbeit am Max-Planck-Institut für Plasmaphysik in Garching in der Abteilung Plasma-Wand-Wechselwirkung. |